



# ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIEROS INDUSTRIALES Y DE TELECOMUNICACIÓN

Titulación :

INGENIERO DE TELECOMUNICACIÓN

Título del proyecto:

Sensores Ópticos para Caracterización de Índice de Refracción  
Basados en Nanolitografía UV sobre Resinas Poliméricas

Ioseba Navarro Arrastio

María José Garde Alduncín

Pamplona, 25 de Febrero de 2010



# Índice General

<b>Capítulo 0. Introducción .....</b>	<b>1</b>
<b>Capítulo 1. Estado del Arte.....</b>	<b>7</b>
<b>1.1 Métodos de fabricación de cristales fotónicos .....</b>	<b>9</b>
•Nanolitografía Ultravioleta Sobre Resinas Poliméricas. ....	11
<b>1.2 Aplicaciones para sensores.....</b>	<b>14</b>
1.2.1 Sensores Interferométricos.....	14
a) Sensor Interferométrico de Guías Periódicas Segmentadas.....	14
b) Imagen Interferométrica Molecular.....	15
1.2.2 Sensores de Fibra Óptica y Fibra de Cristal Fotónico.....	16
a) Sensor de fibra de cristal fotónico .....	16
b) Sensor de fibra de núcleo hueco .....	17
1.2.3 Sensores de Guías de Onda, Cavidades y Anillos Resonantes .....	18
a) Sensores de guía onda.....	18
b) Sensores de cavidades resonantes .....	19
c) Sensores de anillos resonantes .....	20
1.2.4 Sensores de Resonancia de Plasmones de Superficie .....	21
1.2.5 Sensores Basados en Cristales Fotónicos Unidimensionales.....	22
1.2.6 Sensores Basados en Micropalanca.....	23
a) Detección mediante la deflexión de la micropalanca .....	24
b) Detección mediante la frecuencia de resonancia .....	24
<b>Bibliografía para el Capítulo 1. Estado del Arte.....</b>	<b>26</b>
<b>Capítulo 2. Simulación de Sensores de Artículos .....</b>	<b>27</b>
<b>2.1 Sensor de Silicio 2D de Microcavidad.....</b>	<b>30</b>
2.1.1 Diagrama de bandas.....	32
2.1.2 Simulación Sensor .....	34
a. Búsqueda de la Frecuencia de Resonancia.....	34
b. Simulación 2D. ....	36
c. Simulación 3D. ....	37
<b>2.2 Sensor 2D De Guía Onda .....</b>	<b>38</b>
2.2.1 Diagrama de Bandas. ....	40
2.2.2 Simulación Sensor. ....	41
a. Simulación 2D. ....	41
b. Simulación 3D. ....	42
<b>2.3 Conclusiones.....</b>	<b>44</b>
<b>Bibliografía para el Capítulo 2. Simulación de Sensores de Artículos .....</b>	<b>46</b>
<b>Capítulo 3. Red de Difracción en Transmisión.....</b>	<b>47</b>
<b>3.1 Red de difracción de Bragg.....</b>	<b>50</b>
<b>3.2 Diagramas de bandas.....</b>	<b>52</b>
• Estudio de los diagramas de banda en función de la relación $w/a$ .....	53

• Comparación de los diagramas de bandas .....	56
<b>3.3 Simulaciones en 3D .....</b>	<b>61</b>
3.3.1 Simulaciones de la Red de Difracción Base 0nm .....	63
• Material de $n = 1.15$ .....	63
• Material de $n = 1.45$ .....	64
• Material de $n = 1.74$ .....	65
3.3.2 Simulaciones de la Red de Difracción Base de 500nm.....	66
• Material de $n = 1.15$ .....	66
• Material de $n = 1.45$ .....	67
• Material de $n = 1.74$ .....	68
3.3.3 Simulaciones de la Red de Difracción Base de $1.0 \mu\text{m}$ .....	69
• Material de $n = 1.15$ .....	69
• Material de $n = 1.45$ .....	70
• Material de $n = 1.74$ .....	71
<b>3.4 Simulaciones 3D de Potencia Transmitida .....</b>	<b>72</b>
3.4.1 Simulaciones en Transmisión Base 0nm .....	73
• Capa de 200nm de grosor .....	73
• Capa de 500nm de grosor .....	74
• Capa de 700nm de grosor .....	75
3.4.2 Simulaciones en Transmisión Base $0.5 \mu\text{m}$ .....	76
• Capa de 200nm de grosor .....	76
• Capa de 500nm de grosor .....	77
• Capa de 700nm de grosor .....	78
3.4.3 Simulaciones en Transmisión Base $1.0 \mu\text{m}$ .....	80
• Capa de 200nm de grosor .....	80
• Capa de 500nm de grosor .....	81
• Capa de 700nm de grosor .....	82
<b>Bibliografía para el Capítulo 3. Red de Difracción en Transmisión .....</b>	<b>84</b>
 <b>Capítulo 4. Difracción de Fraunhofer.....</b>	 <b>85</b>
 <b>4.1 Difracción de Fraunhofer.....</b>	 <b>87</b>
4.1.1 Intensidad de un Campo de Onda Electromagnético. ....	87
4.1.2 El Principio de Huygens-Fresnel en Coordenadas Rectangulares. ....	89
4.1.3 La Aproximación de Fraunhofer.....	90
4.1.4 Rejilla Delgada de Fase Sinusoidal. (Thin Sinusoidal Phase Grating) .....	92
<b>4.2 Cálculos con Matlab. ....</b>	<b>95</b>
<b>4.3 Simulación con OptiFDTD 8.0.....</b>	<b>98</b>
4.3.1 Resultados de la Simulación. ....	100
<b>Bibliografía para el Capítulo 4. Difracción de Fraunhofer .....</b>	<b>104</b>
 <b>Anexo I. OptiFDTD 8.0 .....</b>	 <b>105</b>
<b>Anexo II. Band Solver .....</b>	<b>161</b>
<b>Anexo III. VB Script.....</b>	<b>175</b>
<b>Anexo IV. Condiciones de Contorno y Modelos de Materiales .....</b>	<b>193</b>



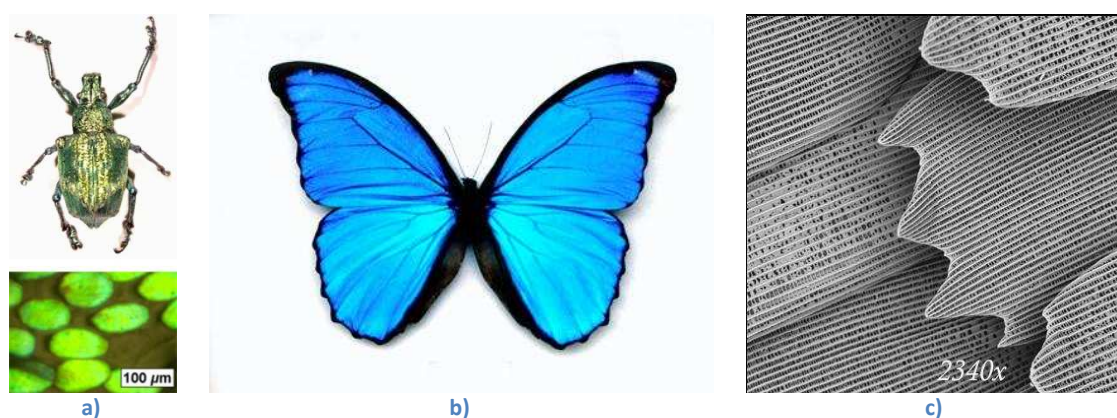




# [Capítulo 0. Introducción]



El color aparece en la naturaleza de formas muy diversas, generalmente con la existencia de pigmentos en los materiales que sustraen de la luz blanca ciertas frecuencias dotando a ese material de color. Sin embargo, ciertos insectos y plumas de aves poseen brillantes colores a pesar de que algunos no contienen pigmentos en su composición. ¿A qué se debe entonces esos colores tan brillantes? Un análisis microscópico de estas estructuras muestra un arreglo periódico de un material transparente en el rango visible del espectro electromagnético (**figura 0.1**). Al hablar de escalas del rango visible del espectro nos encontramos con que la onda que se propaga es sensible a esa estructura. Por tanto, la forma de interaccionar de la onda con materiales dieléctricos puede ser interesante para la fabricación de componentes ópticos capaces de reflejar, confinar o guiar la luz del mismo modo que un metal, pero sin las pérdidas debidas a la absorción del mismo en el espectro visible. Esta ordenación periódica de un material a escalas ópticas da lugar a los **cristales fotónicos**.



**Figura 0. 1 Insectos que muestran una forma de cristales fotónicos en sus alas y caparazones**

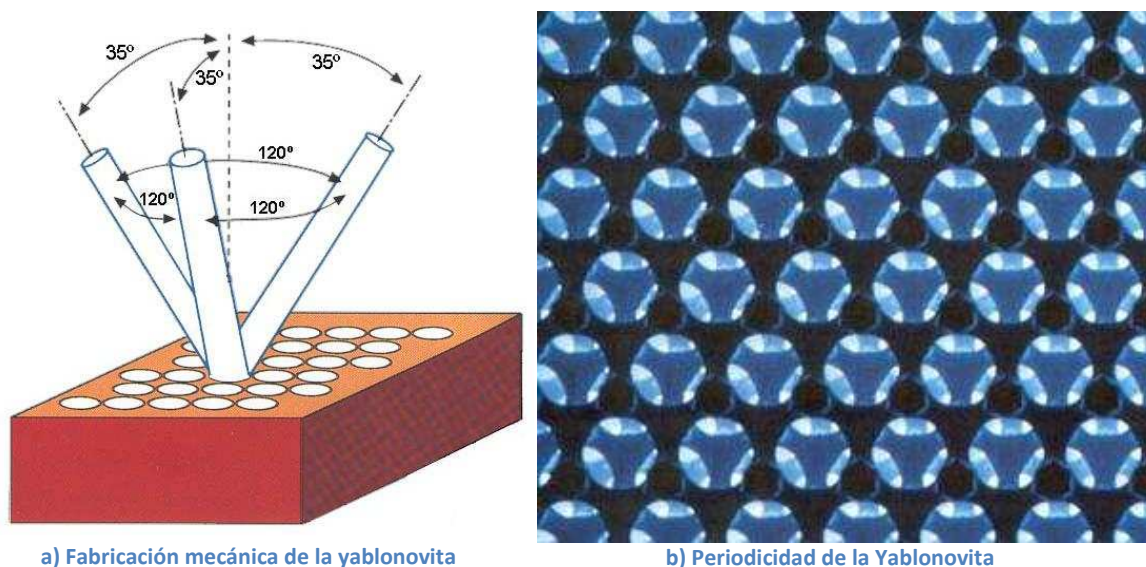
A pesar de que algunas estructuras cuyo índice de refracción es periódico se han estudiado desde el siglo XIII y XIX, como por ejemplo las redes de difracción, no fue hasta los años 80, en las que las tecnologías de fabricación lo hicieron posible, el verdadero despertar de esta tecnología. En 1987 comienza la andadura de lo que actualmente se conoce como cristales fotónicos. Con apenas unas semanas de diferencia los profesores Eli Yablonovitch y Sajeev John proponen la utilización de materiales en los cuales ciertas frecuencias no pudiesen propagarse, si bien su motivación era bastante diferente. El primero, que trabajaba para la compañía *Bell Communications Research*, proponía la utilización de estos materiales en la fabricación de láseres más eficientes. Dado que este tipo de materiales podrían evitar las pérdidas del dispositivo en forma de emisión espontánea, que tienen lugar en la producción de la emisión estimulada que caracteriza a los láseres.

Por otro lado, la propuesta de John consistía en la utilización del rango de frecuencias prohibidas para la localización de luz, al igual que ocurre con los electrones que quedan confinados en sistemas desordenados.

La existencia del gap electrónico así como sus propiedades dependen de la naturaleza del material, es decir de los átomos que lo constituyen así como de su estructura cristalográfica. En el caso de los cristales fotónicos, las estructuras cristalográficas son similares si bien, a una escala mucho mayor. Los primeros están constituidos por átomos de alrededor de un cuarto de nanómetro mientras que los últimos pueden tener una periodicidad variable desde unos 200 nm a varios milímetros. En general, la periodicidad del material ha de ser razonablemente parecida a la longitud de onda de la radiación electromagnética que se quiere controlar. Cuando la luz penetra en estos materiales la radiación se difunde en cada uno de los centros de scattering que

lo forman. El resultado final es que parte de la radiación se verá reforzada mientras que otra quedará anulada en función de ciertos parámetros característicos como su longitud de onda, dirección, índice de refracción de los materiales así como del tamaño y distribución de los centros de scattering. De este modo, y por analogía con los semiconductores, llamamos gap fotónico al rango de frecuencias electromagnéticas en las que no existen modos de propagación permitidos para ninguna dirección del cristal. Cuando la ausencia de modos sólo aparece para ciertas direcciones del espacio, recibe el nombre de pseudogap.

El primer cristal fotónico moderno lo fabrica Yablonovitch, llamado **yablonovita**, se trata de un cristal con estructura en diamante sobre un material de un índice de refracción de 3.6, y en cuya fabricación se hacen agujeros mecánicamente con una aguja. La periodicidad de esta estructura, de varios milímetros, mostraba un gap fotónico en el rango de las microondas, en la **figura 0.2-a y b** puede verse el proceso de fabricación y una imagen de la yablonovita con una constante de periodicidad de 6mm respectivamente.



a) Fabricación mecánica de la yablonovita

b) Periodicidad de la Yablonovita

Figura 0. 2 Yablonovita

Los cristales fotónicos se clasifican, generalmente, según su **estructura cristalina**. La estructura cristalina está relacionada con la forma en la que queda modulado el índice de refracción de una estructura. De este modo, se puede hablar de cristales fotónicos unidimensionales (1D), bidimensionales (2D) y tridimensionales (3D), en los que en los cristales 2D se tienen estructuras triangular, hexagonal y cuadrada, mientras que los sistemas 3D pueden presentar cualquiera de las estructuras correspondientes a los 32 grupos puntuales cristalográficos (o 230 grupos espaciales). En la **figura 0.3** puede observarse un ejemplo de estos cristales fotónicos.



Figura 0. 3 Cristales fotónicos 1D, 2D y 3D

A parte de caracterizarse por su estructura cristalina, para definir los cristales fotónicos se utilizan los siguientes parámetros:

- **Estructura cristalina:** Relacionada con la forma en que queda modulado el índice de refracción.
- **Topología:** El campo queda concentrado en las zonas de mayor índice de refracción, por lo que es importante conocer la disposición de estos centros de scattering. Si estos se encuentran aislados entre sí e inmersos en un medio de menor índice, se trata de una topología tipo Cermet. Por el contrario, si los centros de scattering se encuentran interconectados se dice que adoptan una topología tipo Network. En la **figura 0.4** siguiente se muestra un ejemplo de cada una de las topologías, la primera es una topología tipo Cermet, de pilares sobre aire, y la segunda es una topología Network de pilares de aire sobre un medio de índice mayor.

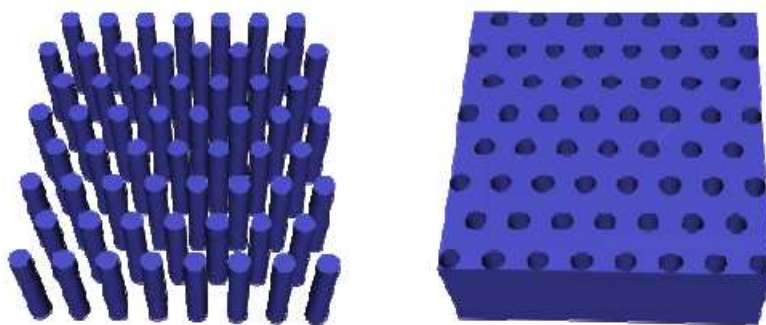


Figura 0. 4 Topología tipo Cermet y Network respectivamente

- **Contraste de índices:** Es la razón entre los índices de refracción mayor y menor del material compuesto que forma el cristal fotónico. En general existe un umbral por debajo del cual no se abre ningún gap fotónico completo. Este umbral será diferente para las distintas estructuras y topologías.
- **Factor de llenado:** Es la razón entre el volumen ocupado por uno de los materiales con respecto al volumen total.

La combinación de estos factores da lugar a multitud de cristales fotónicos con propiedades diferentes que afectan a las ondas electromagnéticas que se propagan por ellos.

La inclusión de un defecto en un cristal fotónico puede dar lugar a modos localizados, por tanto, un defecto puntual puede verse como una cavidad resonante para cierto modo. Una línea de defecto en un cristal bidimensional, por ejemplo, guiará un rango de longitudes de onda. Un repaso a aplicaciones de los cristales fotónicos y más concretamente a aplicaciones de sensores ópticos, se dará en el Capítulo 1. Estado del Arte.





# [Capítulo 1. Estado del Arte]



En este capítulo se procederá a realizar un estudio de los distintos tipos de sensores existentes basados en estructuras de **cristales fotónicos** y **óptica integrada**. Los sensores ópticos basados en estructuras de cristal fotónico o en óptica integrada tienen unas características muy apropiadas para utilizarlos en según qué entornos y objetivos. Es muy interesante la capacidad de estos sensores en el mundo de la biotecnología y medicina, puesto que algunos de este tipo de sensores son capaces de funcionar sin la necesidad del marcado de muestras, el método llamado *label-free*, que reduce la complejidad en el tratamiento de las muestras al detectar directamente los parámetros necesarios. Además estos tipos de sensores pueden presentar gran sensibilidad, estabilidad mecánica, posibilidad de miniaturización en integración en microsistemas y fabricación a gran escala.

Dado que en el proyecto se realizará el estudio de un sensor basado en cristales fotónicos unidimensionales, fabricados mediante la técnica de **nanolitografía UV sobre resinas poliméricas**, también convendrá al menos mencionar distintos métodos de fabricación de cristales fotónicos, poniendo más atención a la técnica de la nanolitografía UV.

De este modo, se procede a realizar un breve resumen de algunas técnicas de fabricación de cristales fotónicos.

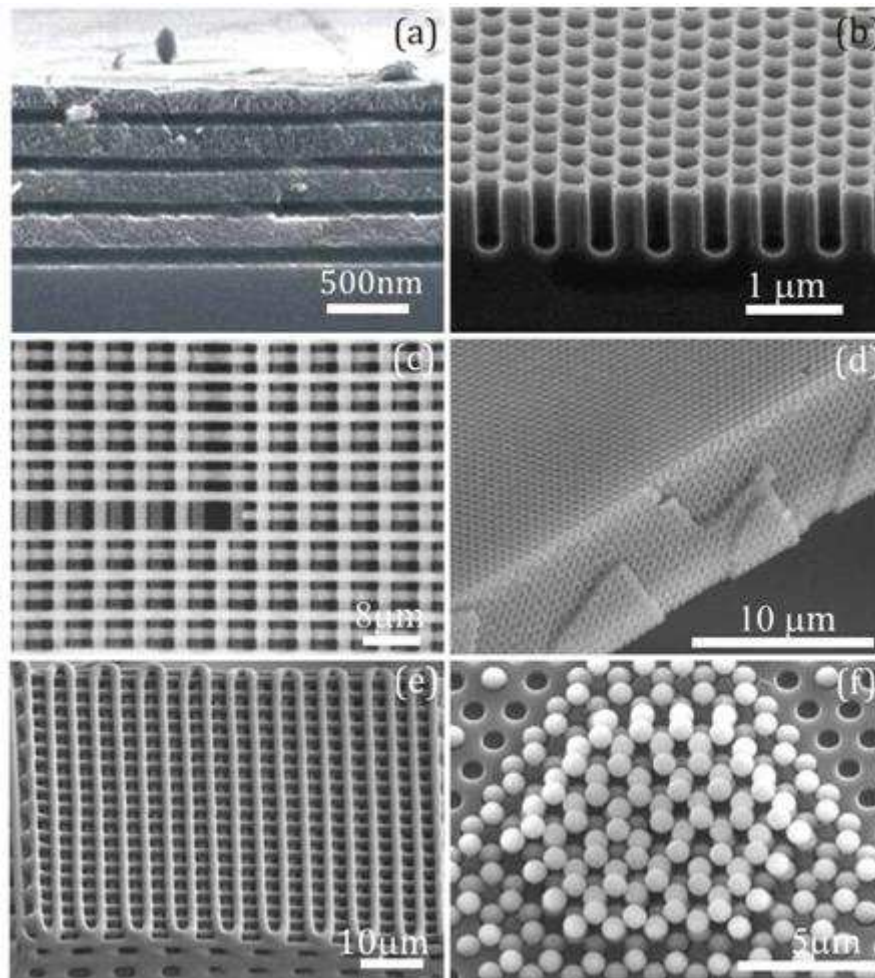
## 1.1 Métodos de fabricación de cristales fotónicos

Existen multitud de métodos de fabricación de cristales fotónicos dependiendo de la estructura que se desee construir y del rango de operación sobre el que se desee actuar [1.1]. La fabricación de cristales fotónicos unidimensionales puede realizarse mediante diferentes métodos como la pulverización catódica, en la que un material se deposita en finas capas al ser bombardeado con iones energéticos, o técnicas de recubrimientos ópticos, tales como dip coating, en los que las capas se realizan sumergiendo un material en un líquido que deposita la capa al sacarlo, o spin coating (**figura 1.1-a**), en los que el depositado del material en finas capas se realiza sobre un soporte rotatorio que elimina el exceso drenándolo por su giro a gran velocidad. La técnica de la nanolitografía interferométrica láser-UV permite crear cristales fotónicos unidimensionales, pero no de la forma más ideal que sería la multicapa, aun así, se explicará más adelante con más profundidad puesto que se trata de la técnica con la que se han fabricado los dispositivos sobre los que se realizará el estudio de este proyecto.

Los cristales fotónicos bidimensionales son estructuras periódicas en el plano en el que se desea confinar la luz (**figura 1.1-b**), puesto que en general, en estas estructuras se confina la luz en el plano perpendicular al plano del cristal fotónico mediante reflexión total interna. Para ello se suelen fabricar cilindros de aire dispuestos periódicamente en un material de mayor índice de refracción, o la estructura inversa, cilindros de ese material en aire. Tampoco tienen por qué ser cilindros, existen otro tipo de formas que sirven para otorgar distintas propiedades al cristal fotónico, pero se puede decir que lo más general son los cilindros. Existen materiales dieléctricos tales como el silicio macroporoso, o el óxido de aluminio poroso que son de por sí cristales fotónicos bidimensionales, puesto que presentan una distribución periódica de cavidades. En los últimos 15 años se ha realizado un gran esfuerzo para obtener estructuras periódicas con dimensiones ópticas, usando principalmente materiales compuestos III-V. Las técnicas más usadas son las litográficas, o el grabado del patrón periódico sobre resinas para transferirlas después [1.2].

Las técnicas de fabricación de cristales fotónicos 2D se emplean también para crear estructuras tridimensionales. De hecho, en muchos casos, se forman directamente del apilamiento de estructuras 2D fusionando las obleas donde se encuentra el patrón bidimensional. Algunas técnicas para la creación patrones tridimensionales serían la litografía electrónica (**figura 1.1-c**), litografía holográfica (**figura 1.1-d**), la escritura directa mediante laser (**figura 1.1-e**) o la manipulación mecánica con robots (**figura 1.1-f**).

Otro método sencillo y económico para obtener cristales fotónicos tridimensionales consiste en aprovechar la tendencia natural que tienen los coloides esféricos monodispersos de formar estructuras de simetría fcc (face centered cubic, cúbica centrado en las caras).



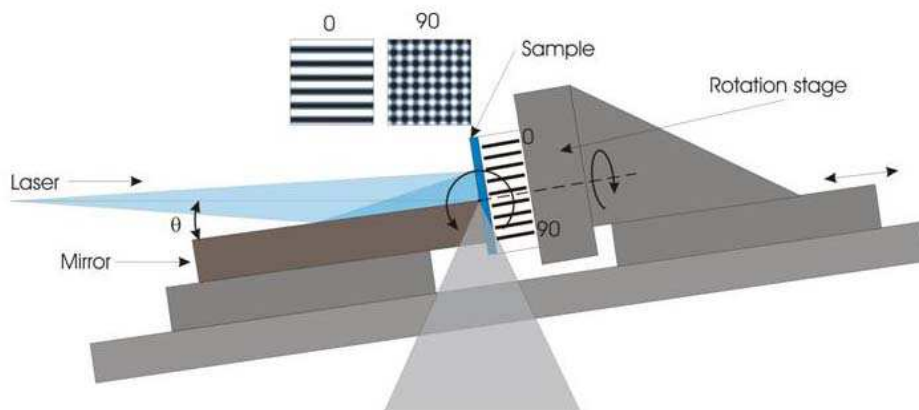
**Figura 1. 1** Cristales fotónicos fabricados con las técnicas mencionadas arriba

Aunque ya se ha mencionado la existencia de técnicas litográficas para la fabricación de cristales fotónicos bidimensionales, a continuación se hará una breve descripción de la técnica de nanolitografía ultravioleta para la creación de cristales fotónicos sobre fotorresinas poliméricas.

- **Nanolitografía Ultravioleta Sobre Resinas Poliméricas.**

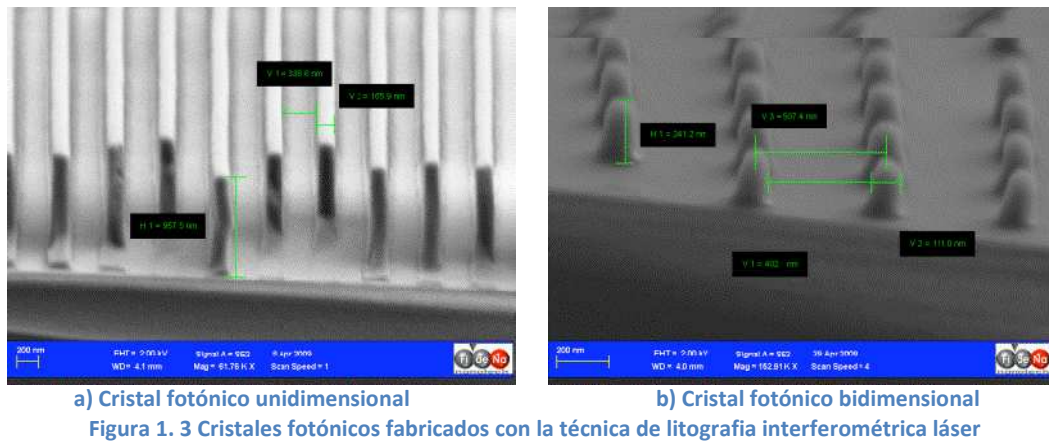
La nanolitografía interferométrica láser es una técnica bastante común en la fabricación de patrones periódicos a nanoescala [1.3, 1.4]. Esta técnica foto-litográfica se basa en la activación de una fotorresistencia mediante el patrón de interferencia generado por dos o más haces de luz coherentes espacialmente. La interferometría láser puede imprimir patrones periódicos eficientemente en un sustrato sensible a la luz con una resolución aproximada de la mitad de la longitud de onda del láser. Reduciendo la longitud de onda de haz del láser produce un camino directo y simple para realizar patrones de interferencia de dimensiones de decenas de nanómetros o menores.

La fabricación de los cristales fotónicos se hace siguiendo un proceso meticuloso. Primero se posa la resina sobre un sustrato mediante la técnica de spin coating, luego se realiza un pre-cocido a 90-120°C de 1 a 3 minutos. Después del pre-cocido se realiza la exposición UV con una dosis que dependerá del material y la profundidad que se desee, para posteriormente realizar un post-recocido de 100 a 150°C durante 60 segundos y para finalizar realizar el revelado de la estructura. Para realizar la exposición UV se suele usar un espejo de Lloyd (**figura 1.2**), en la que una exposición única imprime un patrón unidimensional (**figura 1.3-a**), y una exposición a 0° con otra a 90° genera un patrón bidimensional de columnas de resina tras el revelado (**figura 1.3-b**).



**Figura 1. 2** Espejo de Lloyd, en la parte superior se observa los patrones periódicos generados por una exposición directa y por una doble girando 90° de la primera exposición

Como se ha comentado anteriormente, la dosis de fotones recibida por la resina incide directamente en la profundidad del revelado. Una dosis alta producirá un revelado mayor que una exposición a una dosis menor. En una estructura bidimensional de pilares de resina se producirá un mayor estrechamiento de los pilares para una mayor dosis de exposición. En la **figura 1.4** y **1.5** puede verse un ejemplo de las diferencias obtenidas según la exposición.



La **figura 1.4** muestra un patrón periódico de pilares de resina, en **a** lo calculado computacionalmente, y en **b** la imagen de microscopio para una exposición de  $10 \text{ mJcm}^{-2}$ , en este caso se trata de nanolitografía UV extrema [1.3] sobre PMMA, en la que la longitud de onda del laser es de  $\lambda = 46.9 \text{ nm}$ .

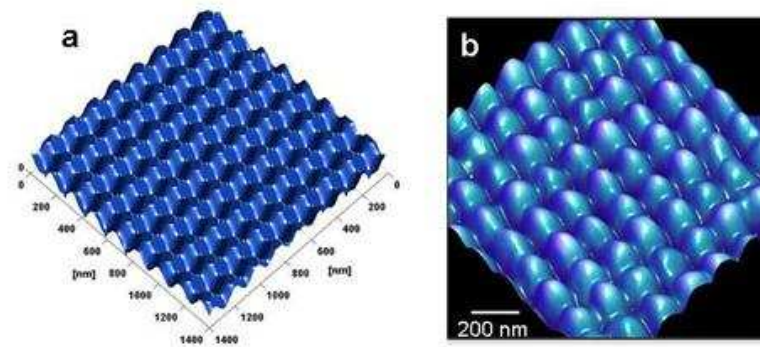


Figura 1. 4 Cristal fotónico fabricado mediante una dosis de exposición de  $10 \text{ mJcm}^{-2}$

La **figura 1.5** muestra lo mismo que en la **figura 1.4**, solo que la dosis de exposición es tres veces superior al caso anterior, con una dosis de  $30 \text{ mJcm}^{-2}$ .

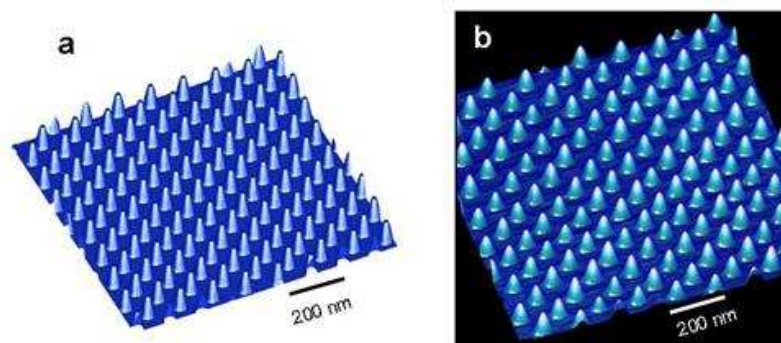


Figura 1. 5 Cristal fotónico fabricado mediante una dosis de exposición de  $30 \text{ mJcm}^{-2}$



## 1.2 Aplicaciones para sensores

Existen multitud de aplicaciones para sensores ópticos, desde sensores biológicos, de temperatura, de tensión o de índice de refracción. La óptica integrada, los cristales fotónicos o la fibra suponen unos soportes especialmente adecuados para el uso en sensores de alta sensibilidad y robustos frente a interferencias externas.

Los biosensores basados en dispositivos de óptica integrada o de cristales fotónicos están empezando a adquirir una gran importancia en el mercado comercial. Estos sensores se basan en el principio de modulación del campo evanescente, es decir, en una estructura la luz se guía por confinamiento y por reflexión total interna, pero el campo electromagnético no queda estrictamente confinado en el núcleo de la guía de onda, si es el caso, si no que sino que presenta un decaimiento exponencial en las zonas que envuelven al núcleo, dando lugar al llamado campo evanescente. Las interacciones moleculares que se produzca dentro de este campo evanescente producirán cambios en las características de la luz que se propaga. Por tanto, estos dispositivos son muy potentes, que permiten la detección del analito de manera selectiva, directa y rápida.

### 1.2.1 Sensores Interferométricos

La configuración de sensores basados en métodos interferométricos tienen una alta sensibilidad. Cuando tiene lugar una reacción de reconocimiento molecular (cuando las moléculas se enlazan con las moléculas específicas que se quieren detectar) en la rama sensora del interferómetro se produce un cambio de fase entre las dos ramas, que se detecta como un cambio en el patrón de interferencia. La intensidad de este patrón dependerá, entre otras cosas, del incremento de masa en la rama de la medida, y será en función de la concentración del analito en el medio. En la **figura 1.6** pueden verse dos configuraciones de este tipo de sensores, **figura 1.6-a**, un sensor basado en una configuración interferométrica Mach-Zehnder, y la **figura 1.6-b**, un sensor basado en la misma configuración [1.5].

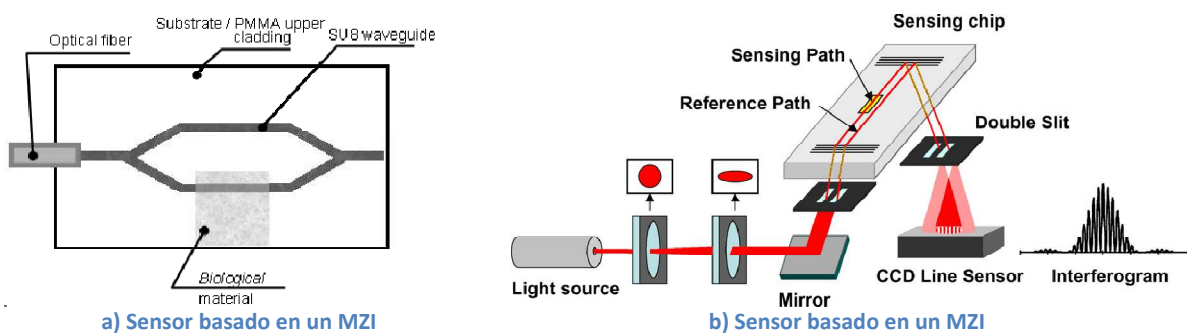


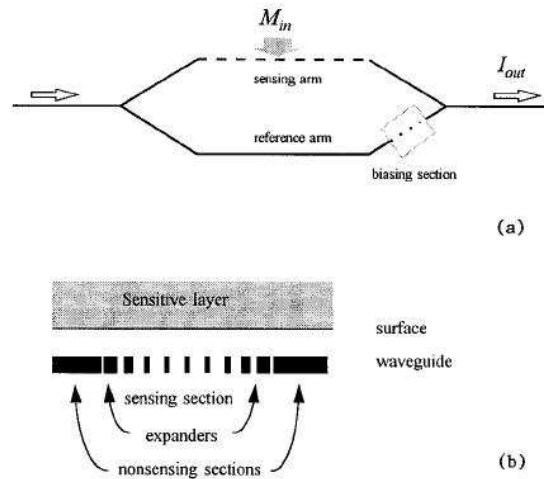
Figura 1. 6 Sensores interferométricos

#### a) Sensor Interferométrico de Guías Periódicas Segmentadas

El uso de los sensores interferométricos está bastante extendido en la actualidad, pero en este caso se presenta una configuración basada en una guía segmentada periódicamente. Esta configuración tiene la ventaja de poder controlar la sensibilidad y el punto de operación

fácilmente simplemente con parámetros geométricos, lo que facilita la realización de arrays de sensores más complejos [1.6].

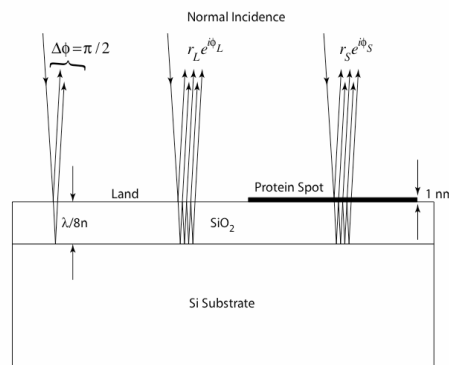
En la **figura 1.7** puede verse la configuración del sensor interferométrico comentado anteriormente. El segmentado de la guía y la sección de bias sirve para controlar la sensibilidad y compensar cualquier asimetría en la configuración interferométrica, pudiéndose usar la guía segmentada tanto como referencia o como para el sensado.



**Figura 1. 7 Sensor MZI de guías segmentadas periódicamente**

## b) Imagen Interferométrica Molecular

El artículo en el que se basa este apartado muestra una combinación de interferometría de corte lateral de camino común combinada con imagen CCD, que consigue una resolución de 15pm de altura en superficie [1.7]. Una estructura de óxido de silicio ( $\text{SiO}_2$ ) con un grosor de una octava parte de la longitud de onda sobre un sustrato de silicio realiza la conversión de fase a intensidad mediante la condición de cuadratura de fase impuesta por el grosor del óxido de silicio, **figura 1.8**. La variación de la fase al atravesar una capa de material biológico es detectada como un cambio en la intensidad, por lo que es detectada directamente.



**Figura 1. 8 Principio físico para la imagen interferométrica molecular**



La sensibilidad del sensor depende de la rugosidad del sustrato, pero se conseguido sensibilidades bastante buenas, de 10ng/ml para inmunoensayos de anticuerpos con una ampliación de 7x para una hora de incubación. El sensor es compatible con medidas de tiempo real, logrando una sensibilidad de 2pg/mm<sup>2</sup>. En la **figura 1.9** se muestra una captura de un video en el que muestra en tiempo real la reacción bioquímica de dos sustancias biológicas, en la que se observa el crecimiento de los puntos.

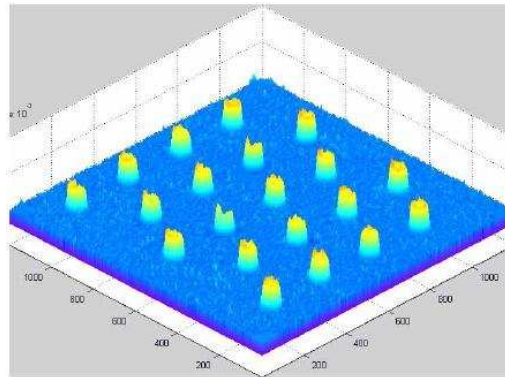


Figura 1. 9 Captura de la reacción bioquímica en tiempo real

### 1.2.2 Sensores de Fibra Óptica y Fibra de Cristal Fotónico

En los últimos años las fibras de cristal fotónico o las fibras huecas han atraído la atención científica y comercial. Una de sus aplicaciones más importantes se encuentra en los sensores de todo tipo, biológicos, de temperatura o tensión son solo un ejemplo. En este apartado se estudiarán dos sensores, uno es muy completo y da una idea del alcance de las fibras de cristal fotónico en la sensibilidad y las aplicaciones que tienen, mientras que el otro es un sensor de temperatura sobre una fibra hueca en la que se han depositado quantum dots en el interior.

#### a) Sensor de fibra de cristal fotónico

El sensor estudiado en [1.8] se basa en una fibra de cristal fotónico en la que el núcleo es un Long Period Grating con una constante de red de  $\Lambda_G$ . Este sensor es utilizado para multitud de aplicaciones, con una efectividad muy grande. En la **figura 1.10** puede observarse el perfil de la fibra de cristales fotónicos con la periodización del núcleo de la misma.

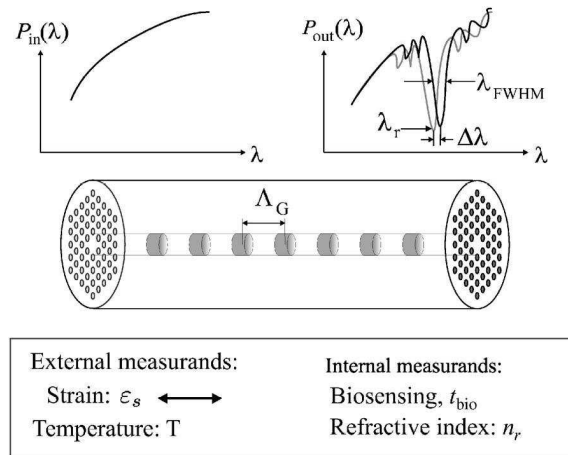


Figura 1. 10 Perfil de una LPG-PhC fiber

## b) Sensor de fibra de núcleo hueco

El sensor estudiado en el artículo [1.9] muestra un sensor de temperatura basado en una fibra hueca, en la que en el interior del núcleo hueco se depositan Quantum Dots mediante la técnica Layer-by-Layer Electrostatic Self-Assembly. El núcleo hueco de la fibra se cierra por ambos extremos y se empalman ambas terminaciones con fibra multimodo estándar. La dependencia con la temperatura de la emisión verde fluorescente de los Quantum Dots queda reflejada experimentalmente en los resultados mostrados en el artículo. Una demostración del tipo de fibra y del montaje de la misma puede verse en la **figura 1.11**.

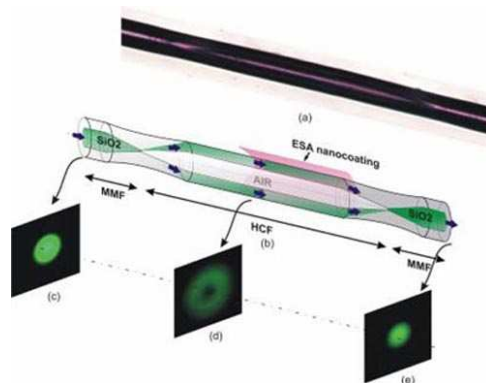


Figura 1. 11 Depositado de quantum dots en una fibra de nucleo hueco

El espectro de emisión de los Quantum Dots muestra una dependencia con la temperatura resultando en una menor intensidad de emisión de los Quantum Dots conforme la temperatura aumenta.

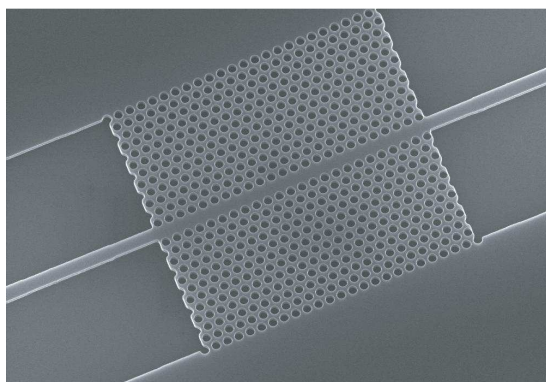
### 1.2.3 Sensores de Guías de Onda, Cavidades y Anillos Resonantes

Los sensores de guías de onda, cavidades y anillos se basan principalmente en el principio de onda evanescente. Un haz de luz será reflejado en su totalidad cuando incida sobre una superficie transparente presente entre dos medios, cuando proceda del medio con mayor índice de refracción y cuando el ángulo de incidencia sea mayor que un valor crítico. En el punto donde se produce la reflexión, se induce un campo electromagnético que penetra en el medio que tiene menor índice de refracción, este campo es denominado onda evanescente y decae exponencialmente con la distancia de penetración, desapareciendo tras unos pocos nanómetros. En realidad este campo de onda evanescente no se produce únicamente en las reflexiones provocadas por el contraste de índices, también se produce en los cristales fotónicos, donde el guiado se produce principalmente por el confinamiento de la luz.

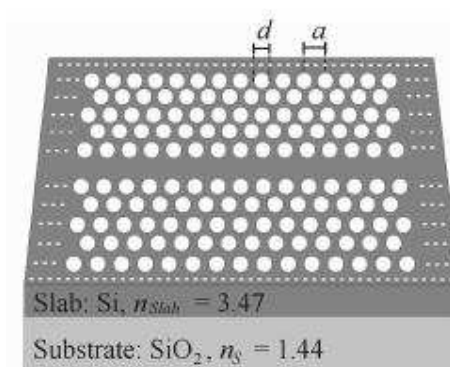
#### a) Sensores de guía onda

Los sensores de guías de onda constituyen uno de los sensores más sensibles a los cambios de índice de refracción en los límites de su entorno. Las guías de onda de cristales fotónicos (2D) tienen la ventaja de que al poderse crear unos espacios para el sensado muy buenos en los cuales la interacción del campo electromagnético y el material de interés es muy grande, por lo que el mínimo cambio en el índice de refracción en las inmediaciones de la guía tiene un efecto apreciable y medible.

En el caso de las guías lo que se mide generalmente es la frecuencia de corte de la guía del modo de orden más bajo guiado. De este modo, al variar el índice de refracción en las proximidades de la guía, esto se traducirá en una variación de la frecuencia de corte [1.10, 1.11, 1.12]. En la **figura 1.12** puede observarse la configuración de un sensor de este tipo, mientras que en la **figura 1.13** se observa los resultados obtenidos para [1.10] en la que se introduce aire y agua en los agujeros creados en silicio, y para cuando lo que se realiza es una detección específica de estreptavidina en el sensor, en la que puede apreciarse una pequeña variación en la frecuencia de corte.



a) Sensor de guía onda de cristal fotónico



b) Perfil de la guía de cristal fotónico

Figura 1. 12 Sensores basados en guías de cristal fotónico

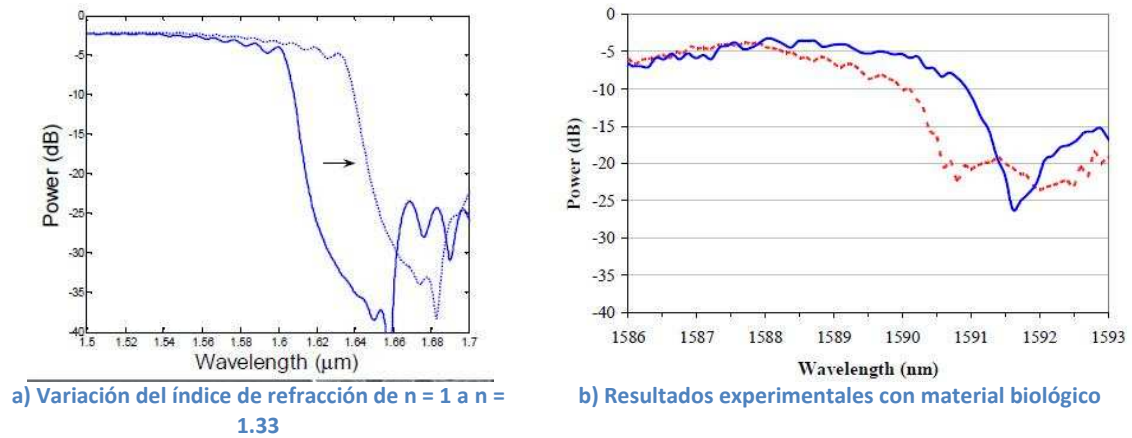


Figura 1. 13 Variación de la frecuencia de corte de los sensores basados en guías de onda

## b) Sensores de cavidades resonantes

La inclusión de un defecto en un cristal fotónico a modo de un agujero mayor o menor si se trata de una celosía de agujeros, o al revés, de un pilar más o menos grueso si se trata de una celosía de nanopilares (hablando de cristales fotónicos bidimensionales) genera un modo en el defecto que puede quedar atrapado y entrar en resonancia. Lo que se crea en estos casos es una **cavidad Fabry-Perot**. Los sensores basados en este tipo de cavidades resonantes se basan en la variación de la frecuencia de resonancia inducido por el cambio de índice de refracción para medir ese cambio precisamente.

Los defectos pueden estar dentro de un cristal fotónico [1.13, 1.14], **figura 1.14-a**, o embutidos en una guía [1.15, 1.16], **figura 1.14-b**. Las cavidades Fabry-Perot también pueden ser excitadas mediante la onda evanescente de la guía [1.17], o puede generarse esta resonancia utilizando una forma de agujeros con alguna característica especial, como pueden ser agujeros en forma de anillo [1.18].

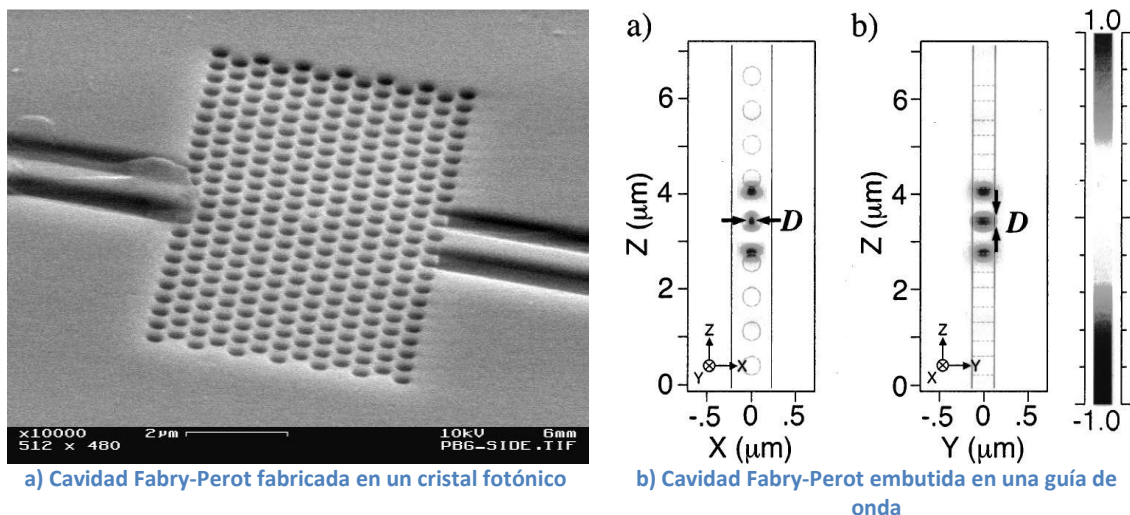


Figura 1. 14 Sensores basados en cavidades resonantes

En la **figura 1.15** puede observarse como al aumentar el índice de refracción en los agujeros de la **figura 1.14-a** varía la frecuencia de resonancia del dispositivo.

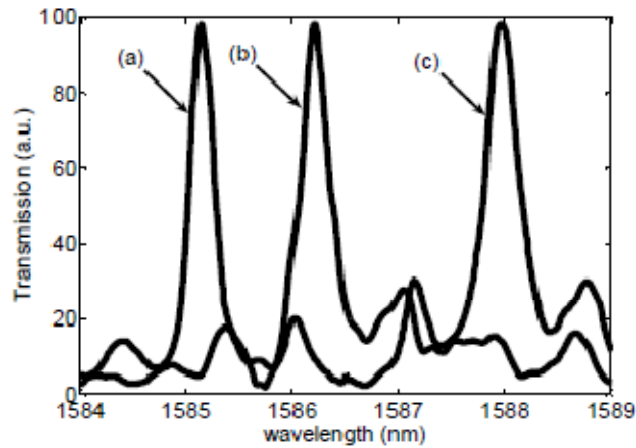


Figura 1. 15 Variación de la frecuencia de resonancia con el índice de refracción de un sensor basado en cavidades

### c) Sensores de anillos resonantes

Cualquier micro resonador en anillo puede ser utilizado a modo de sensor. El campo electromagnético se acopla al anillo mediante el campo de onda evanescente, y es guiado a lo largo del anillo para volver a acoplarse a la guía y así sucesivamente. El anillo funciona como un resonador, por lo que la variación de la frecuencia de resonancia en función del índice de refracción del entorno del anillo es lo que se mide [1.19, 1.20, 1.21].

En la **figura 1.16** puede observarse la configuración de estos anillos resonadores, y en la **figura 1.17** se observa como la variación del índice de refracción tiene un efecto directo sobre el espectro de transmisión del mismo.

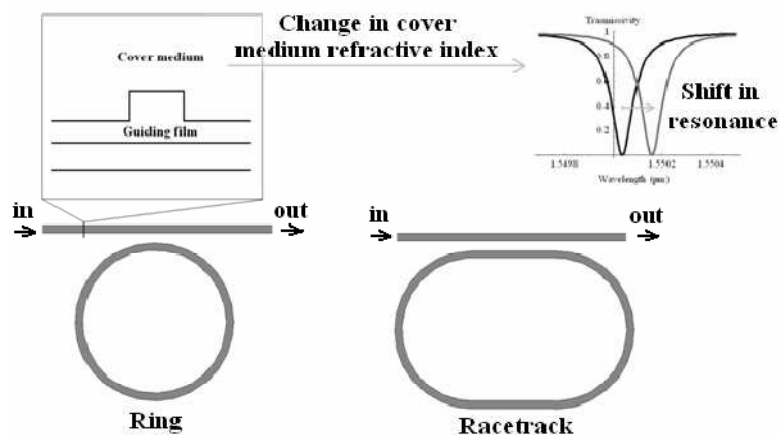


Figura 1. 16 Microanillos resonadores

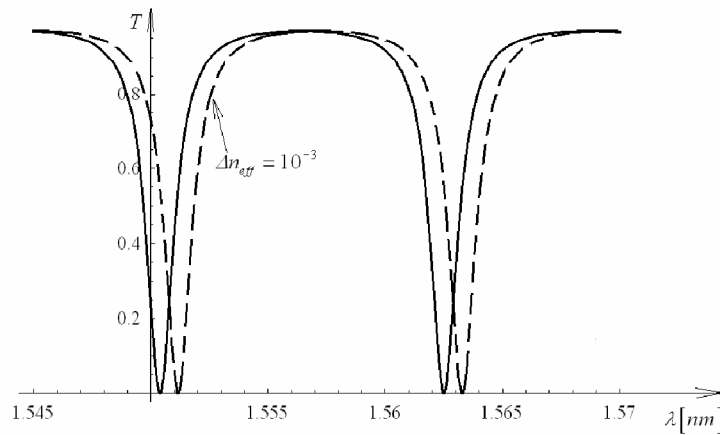


Figura 1. 17 Variación de la transmisión con el índice de refracción

### 1.2.4 Sensores de Resonancia de Plasmones de Superficie

El fenómeno de la **resonancia de plasmones de superficie (SPR)** consiste en la resonancia de plasmones que están confinados a las superficies y que forman un polaritón cuando interactúan con la luz. Ocurren en la interfaz entre un dieléctrico y un metal. Permiten explicar las anomalías en la difracción de una red de difracción metálica y también son útiles en la espectroscopía Raman de superficie entre otras aplicaciones. La resonancia de plasmones superficiales es utilizada en bioquímica para el estudio de mecanismos y la cinética de los enlaces entre los ligandos y los receptores. Al iluminar una superficie con un ángulo muy específico y con cierta intensidad se genera el fenómeno SPR, en general, por tanto cualquier variación en la superficie es apreciable en este fenómeno.

La aplicación del fenómeno SPR en sensores está muy estudiada y se ha convertido en uno de los campos de estudio más importantes en el mundo de los sensores. Existen multitud de tipos distintos de sensores de este tipo, cristales fotónicos de agujeros dobles [1.22] para optimizar el fenómeno, basados en redes de difracción [1.23] o en guías de silicio [1.24] son solo un ejemplo.

Como puede verse en la **figura 1.18** puede verse un ejemplo de una red de difracción utilizada como sensor basado en este fenómeno, y en la **figura 1.19** los resultados obtenidos con este sensor.



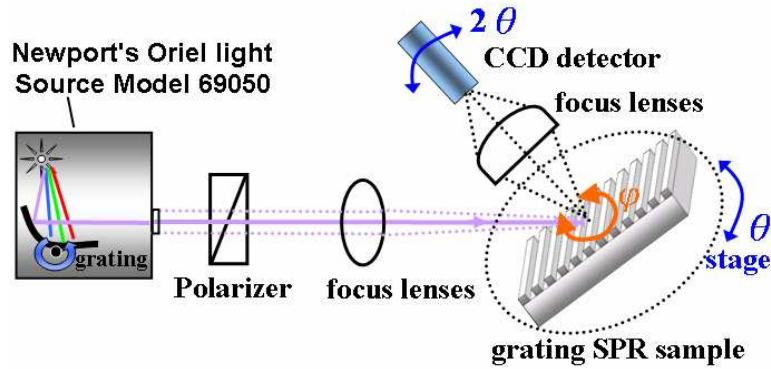


Figura 1. 18 Fenómeno SPR sobre un cristal fotónico unidimensional

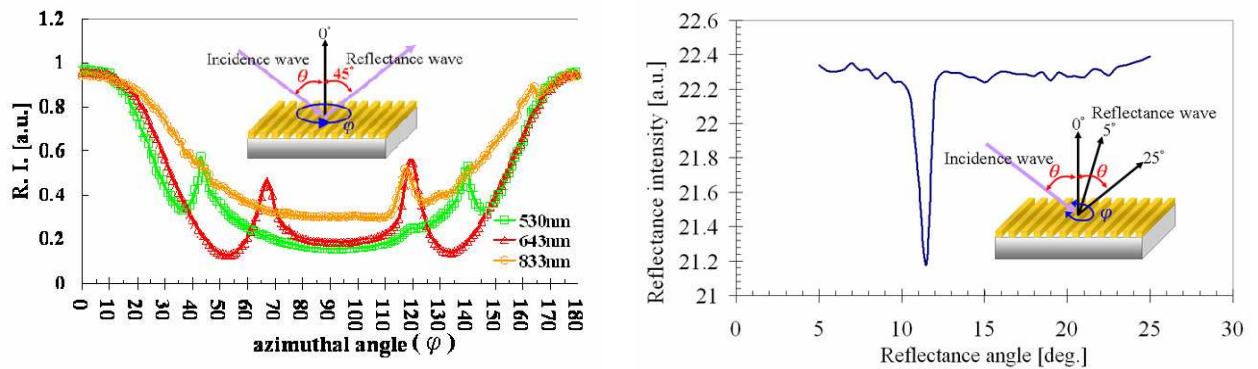


Figura 1. 19 Resultados obtenidos con el método de sensado basado en SPR

### 1.2.5 Sensores Basados en Cristales Fotónicos Unidimensionales

Aunque existen multitud de sensores basados en cristales fotónicos, se ha realizado este apartado de los cristales fotónicos unidimensionales por tratarse de unos sensores fáciles de implementar y con una sensibilidad bastante alta.

Los sensores a los que se refiere este apartado tratan de observar la reflectancia provocada por una red de difracción sobre la que se ha depositado metal [1.2, 1.25, 1.26, 1.27]. En la **figura 1.20** se observa un sensor de este tipo. Se emite luz blanca hacia la red de difracción, y se refleja luz de banda estrecha. La variación del índice de refracción en la superficie del cristal tiene como resultado una variación de la frecuencia central de la luz de banda estrecha reflejada.

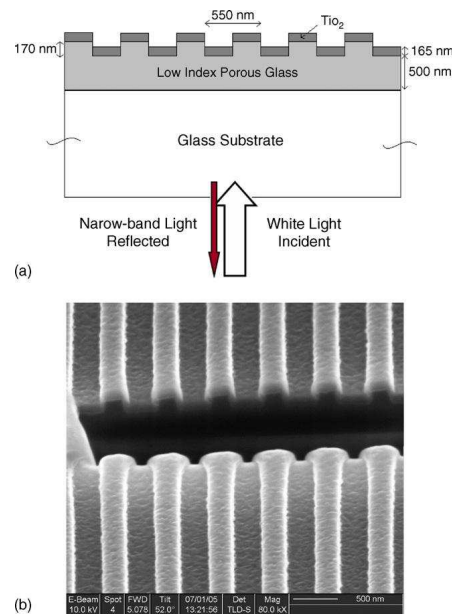


Figura 1. 20 Cristal fotónico unidimensional y principio de funcionamiento

### 1.2.6 Sensores Basados en Micropalanca

La invención del microscopio de fuerzas atómicas (AFM) en 1986 ha permitido la caracterización de superficies orgánicas e inorgánicas a escala nanométrica. Este tipo de microscopía se basa en la medida de una fuerza entre una sonda de tamaño nanométrico y la superficie de la muestra a analizar mediante la detección de la deflexión de una micropalanca de silicio a la cual va unida la sonda. Las dimensiones típicas de estas micropalanca son de 100mm de longitud, 10 mm de anchura y un espesor inferior a la micra [1.28].

Las micropalanca de silicio son suficientemente sensibles como para medir la fuerza correspondiente a un solo enlace entre moléculas biológicas complementarias, inmovilizando una molécula biológica en la punta y su complementaria en la superficie de un sustrato. Esto ha dado lugar a un nuevo tipo de biosensor biológico basado en el uso de dichas micropalanca, que pueden ser micropalanca (**figura 1.21-a-b-c-d**) o cantilevers (micropuentes, **figura 1.21-e-f-g-h**) [1.29]. El proceso de biofuncionalización es el siguiente, primero se inmovilizan sobre la superficie de la micropalanca moléculas biológicas (por ejemplo, anticuerpos) que se enlazan de forma específica con aquellas que se desean detectar. Cuando el analito se enlaza a las moléculas previamente inmovilizadas en la superficie, se produce una respuesta de tipo nanomecánico en la micropalanca que consiste en un cambio de la deflexión y/o en la frecuencia de resonancia de la misma. A continuación se verán dos ejemplos de ambos métodos.

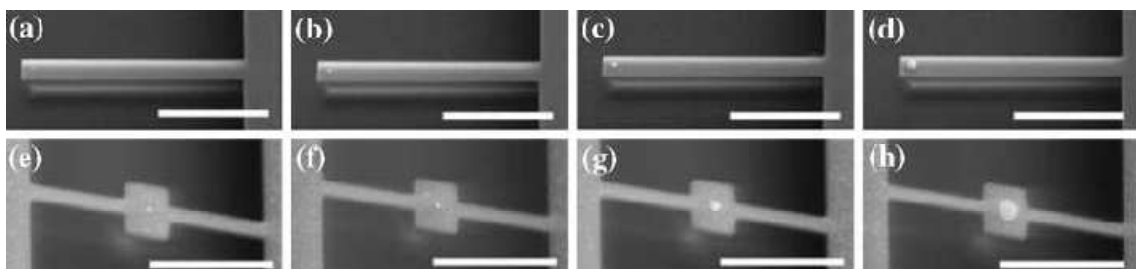


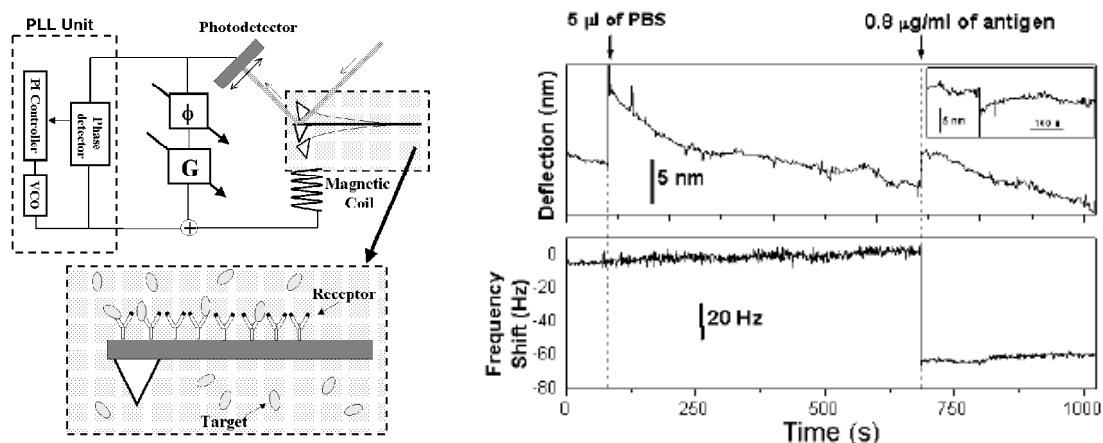
Figura 1. 21 Sensor basado en micropalanca y cantilever



### a) Detección mediante la deflexión de la micropalanca

La magnitud medida es la deflexión de la micropalanca. Las moléculas receptoras se inmovilizan sólo en uno de los lados de la micropalanca. Cuando se introducen en la solución las moléculas del analito, éstas se enlazan sobre la superficie funcionalizada, produciéndose un cambio de la tensión superficial de este lado con respecto al otro lado de la micropalanca, dando lugar a un curvamiento de la micropalanca y una deflexión del orden del nanometro. Sin embargo, la deflexión de la micropalanca es muy sensible a cambios de temperatura debido al efecto bimetalico. Generalmente sobre las micropalanca de silicio se evapora una delgada capa de oro con doble propósito: por un lado para que refleje perfectamente el haz láser y por otro lado para la inmovilización covalente de las moléculas receptoras sobre esta superficie. El efecto bimetalico hace poco prácticos estos dispositivos al ser necesarios tiempos de termalización de varias horas o bien la fabricación de micropalanca de referencia.

La respuesta de la micropalanca se mide generalmente mediante un sistema óptico que consiste en un haz láser que incide sobre la superficie final de la micropalanca y se refleja en un fotodetector segmentado en dos sectores, **figura 1.22-a**. En la **figura 1.22-b** pueden verse una comparativa de los resultados obtenidos con el sensor de la **figura 1.22-a** con el método de detección directa de la deflexión de la micropalanca y con el método de detección basado en la variación de la frecuencia de resonancia.



a) Principio de funcionamiento de un sensor de micropalanca

b) Resultados obtenidos midiendo la deflexión y la frecuencia de resonancia

Figura 1. 22 Sensor basado en micropalanca

### b) Detección mediante la frecuencia de resonancia

El modo dinámico de detección, que no es otro que el que mide la frecuencia de resonancia, depende tanto del cambio de tensión superficial como del cambio de masa provocado por el enlazamiento de moléculas específicas. La detección de la frecuencia de resonancia no se ve afectada por la temperatura, al contrario que sucede con la detección de la deflexión de la palanca.

La deflexión de la micropalanca o del cantiléver provoca un cambio en la frecuencia de resonancia de la estructura, ya sea una micropalanca [1.29] o una guía de cristales fotónicos con

un defecto en un cantiléver según el cual provoca resonancia para una longitud de onda determinada, y cuando la masa sobre el cantiléver lo deforme variara la frecuencia de resonancia de la cavidad, **figura 1.23** [1.30]. El funcionamiento de la micropalanca puede observarse en la **figura 1.21-a-b-c-d**, puesto que funciona de ese modo, mientras que en la **figura 1.21-e-f-g-h** se tiene un sensor basado en un cantiléver. El sensor con la guía de cristales fotónicos a modo de cantiléver, **figura 1.23**, obtiene unos resultados notables, y puede verse en la **figura 1.24** el desplazamiento de la frecuencia de resonancia debido a la deflexión provocada por el material posado sobre él. Tiene un límite de detección de una fuerza provocada por el material posado de  $0.25\mu\text{N}$  o equivalentemente una deflexión de  $20\text{nm}$ .

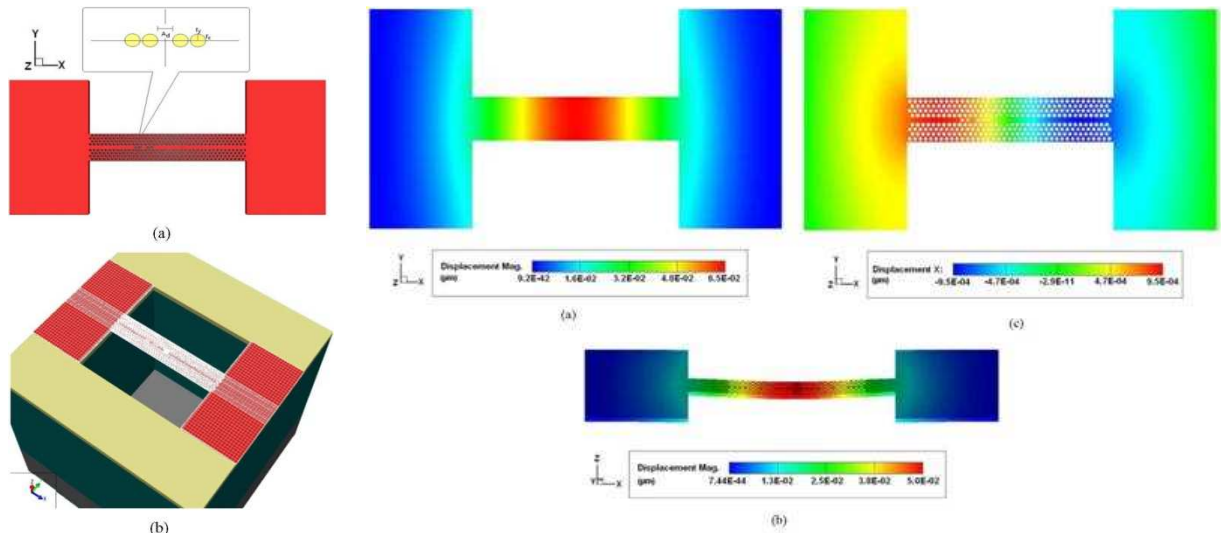


Figura 1. 23 Cantilever con una guía de cristal fotónico

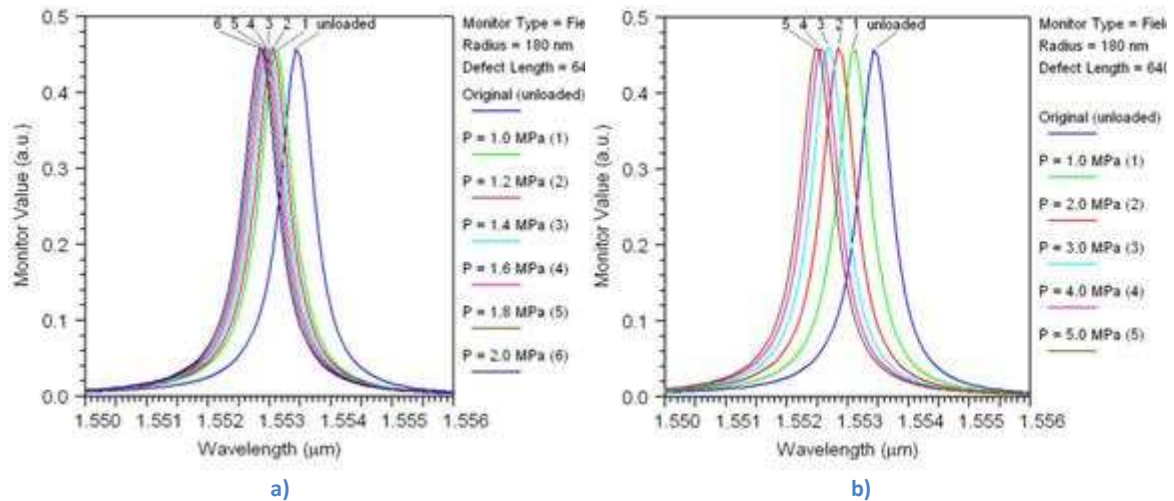


Figura 1. 24 Resultados de la variación de la frecuencia de resonancia del cantilever

Bibliografía utilizada para el Capítulo 1. Estado del Arte:

[1.1] “Preparación, Caracterización y Modelización de Cristales Fotónicos Coloidales para Aplicaciones en Células Solares”, Antonio Agustín Mihi Cervelló, Universidad de Sevilla.

[1.2] “Large area submicron replica molding of porous Low-k dielectric films and application to photonic crystal biosensor fabrication”, Ian D. Block, Leo L. Chan, Brian T. Cunningham.

[1.3] “Patterning of nano-scale arrays by table-top extreme ultraviolet laser interferometric lithography”, P. W. Wachulak, M. G. Capeluto, M.C. Marconi, C.S. Menoni, J. J. Rocca.

[1.4] “Nanopatterning with extreme ultraviolet interference lithography for nanoelectronics and biotechnology”, Brigitte Städler, Harun Solak, Susanne Frerker, Michelle Grandin, Jam Vörös.

[1.5] “Desarrollo de microsensores interferométricos con tecnología de silicio para aplicaciones biológicas”, F. Prieto, B. Sepulveda, a. Llobera, A. Calle, C. Domínguez, L.M. Lechuga.

[1.6] “Evanescent field sensors with periodically segmented waveguides”, Z. Weissman

[1.7] “Molecular interferometric imaging”, Ming Zhao, Xuefeng Wang, David D. Nolte.

[1.8] “Sensitivity of photonic crystal fiber grating sensors: biosensing, refractive index, strain, and temperature sensing”, Lars Rindorf, Ole Bang.

[1.9] “Fiber optic temperature sensor depositing quantum dots inside hollow core fibers using the layer by layer technique”, Javier Bravo, Javier Goicoechea, Jesús M. Corres, Francisco J. Arregui, Ignacio R. Matias.

[1.10] “Specific detection of proteins using photonic crystal waveguides”, S. C. Buswell, V. A. Wright, J. M. Buriak, V. Van, S. Evoy.

[1.11] “Photonic-crystal waveguide biosensor”, Nina Skivesen, Amélie Têtu, Martin Kristensen.

[1.12] “Integrated photonic crystal waveguides for micro-bioanalytical devices”, G. J. Sonck.

[1.13] “Nanoscale microcavity sensor for single particle detection”, Mindy R. Lee, Philippe M. Fauchet.

[1.14] “Two-dimensional Si photonic crystal microcavity for single particle detection”, Mindy R. Lee, Philippe M. Fauchet.

[1.15] “Ultracompact refractive index sensor based on microcavity in the sandwiched photonic crystal waveguide structure”, Xiaoling Wang, Zhenfeng Xu, Naiguang Lu, Jun Zhu, Guofan Jin.

[1.16] “Nanocavity in a silicon waveguide for ultrasensitive nanoparticle detection”, Bradley Schmidt, Vilson Almeida, Christina Manolatos, Stefan Preble, Michal Lipson.

[1.17] “Nanoscale optofluidic sensor arrays”, Sudeep Mandal, David Erickson.

[1.18] “Properties, applications and fabrication of photonic crystals with ring-shaped holes in silicon-on-insulator”, A. Säynätjoki, M. Mulot, K. Vynck, D. Cassagne, J. Ahopelto, H. Lipsanen.

[1.19] “Guided-wave optical biosensors”, Vittorio M. N. Passaro, Francesco Dell’Olio, Biagio Casamassima, Francesco De Leonardis.

[1.20] “Optical biosensor based on silicon-on-insulator microring resonators for specific protein binding detection”, K. De Vos, I. Bartolozzi, P. Bienstmann, R. Baets, E. Schacht.

[1.21] “Integrated optical microcavities for enhanced evanescent-wave spectroscopy”, E. Krioukov.

[1.22] “Periodic nanohole arrays with shape-enhanced Plasmon resonance as real-time biosensors”, Antoine Lesuffleur, Hyungsoon Im, Nathan C. Lindquist, Sang-Hyun Oh.

[1.23] “Advanced metal nanostructure design for surface Plasmon photonic bandgap biosensor device”, Nan-Fu Chiu, Shou-Yu Nien, Jiun-Haw Lee, Chii-Wann Lin.

[1.24] “Waveguide surface Plasmon resonance sensors”, R. D. Harris, J. S. Wilkinson.

[1.25] “A new method for label-free imaging of biomolecular interactions”, Peter Y. Li, Bo Lin, John Gerstenmaier, Brian T. Cunningham.

[1.26] “Photonic crystal optical biosensor incorporating structured low-index porous dielectric”, Ian D. Block, Leo L. Chan, Brian T. Cunningham.

[1.27] “Near ultraviolet-wavelength photonic crystal biosensor with enhanced surface-to-bulk sensitivity ratio”, Nikhil Ganesh, Ian D. Block, Brian T. Cunningham.

[1.28] “Biosensores nanomecánicos basados en micropalanca de silicio”, J. Tamayo, L. M. Lechuga.

[1.29] “Nanobiosensors: optofluidic, electrical and mechanical approaches to biomolecular detection at the nanoscale” David Erickson, Sudeep Mandal, Allen H. J. Yang, Bernardo Cordovez.

[1.30] “Design and modeling of a nanomechanical sensor using silicon photonic crystals”, Chengkuo Lee, Rohit Radhakrishnan, Chii-Chang Chen, Jing Li, Jayaraj Thillaigovindan, N. Balasubramanian.

## [Capítulo 2. Simulación de Sensores de Artículos]



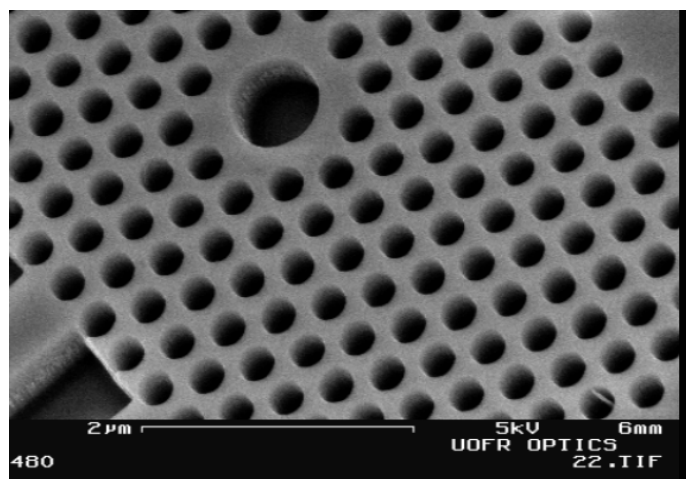
En este capítulo se llevará a cabo el estudio con el paquete software **OptiFDTD 8.0** de dos sensores basados en cristales fotónicos encontrados en la bibliografía. Una breve descripción sobre el uso del paquete software puede encontrarse en los Anexos, se recomienda leerlos antes de continuar con éste y los siguientes capítulos.

El primer sensor se basa en una cavidad resonante, preparada para resonar a cierta longitud de onda, y en el que esa resonancia varía al introducir una partícula de látex en la microcavidad. El segundo sensor se basa en una guía de cristales fotónicos formada por una línea de defecto en su estructura (ambos sensores son 2D con una celosía hexagonal de agujeros de aire sobre silicio). En el sensor de la guía se trata de caracterizar la variación en la longitud de onda de corte del último modo guiado al introducirle distintos materiales en los agujeros.

En los siguientes apartados se muestra en primer lugar un breve resumen de los artículos estudiados, con los resultados más característicos, para continuar con el procedimiento seguido para su estudio con el paquete software. En el último punto se sacarán algunas conclusiones generales de este capítulo.

### 2.1 Sensor de Silicio 2D de Microcavidad.

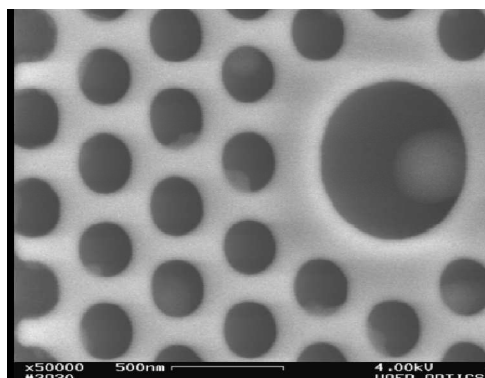
La prueba del sensor en el simulador, propuesto en los artículos “*Two-dimensional Si photonic crystal microcavity for single particle detection*” [2.1] y “*Nanoscale microcavity sensor for single particle detection*” [2.2] de M. R. Lee y Philippe Fauchet. La estructura de este sensor está formada por una celosía hexagonal de agujeros de aire sobre silicio con una constante de red (separación entre agujeros) de 400nm y un radio de los mismos de 120nm. En el centro de la malla de 23x13 agujeros hay un defecto mayor, de radio 342.5nm, que hará de cavidad resonante. El sensor actúa como una cavidad resonante de Fabry-Perot, **figura 2.1**.



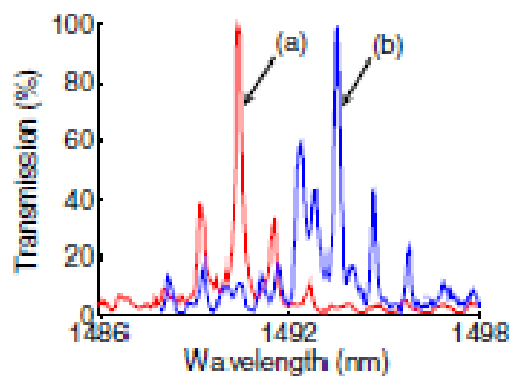
**Figura 2. 1 Sensor de microcavidad resonante, imagen obtenida de [2.1]**

En el artículo sobre el sensor se calcula la variación de la frecuencia de resonancia al introducir una esfera de látex en la cavidad (ver **figura 2.2-a**), y analiza la variación de esa frecuencia de resonancia del sensor según la posición de la esfera de látex dentro de la cavidad, **figura 2.2-b**. Según el artículo, cuando la esfera está pegada a la pared de la cavidad se obtiene

un desplazamiento de la frecuencia de resonancia mayor que si la esfera está perfectamente centrada en la cavidad.



a) Esfera de látex



b) Resonancia

Figura 2. 2 Análisis del efecto que tiene la introducción de una esfera de látex en la microcavidad

La esfera de látex tiene un diámetro de 350nm, cercano al de varios virus comunes.

Los resultados obtenidos en el artículo se muestran en la **figura 2.3**, los puntos rojos muestran los resultados obtenidos mediante simulación, unidos con una línea del mismo color, mientras que el punto azul muestra el resultado experimental obtenido con la esfera de látex de 350nm de diámetro.

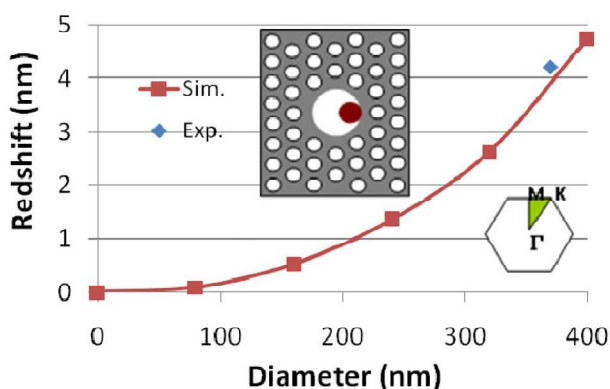


Figura 2. 3 Efectos de la variación del diámetro de la esfera de látex sobre la frecuencia de resonancia

Tras esta breve introducción de los parámetros del sensor y de los resultados mostrados por los artículos, se procederá a la simulación del mismo sensor con el paquete software OptiFDTD 8.0 para comprobar si los resultados que se obtengan son iguales, los resultados obtenidos distan mucho de los mostrados en este subapartado.



### 2.1.1 Diagrama de bandas.

Antes de comenzar a realizar las simulaciones del sensor en sí, se comprueba la situación de los gaps generados por la celosía hexagonal de agujeros de aire sobre silicio. Estos diagramas de bandas se calculan sin la cavidad resonante del sensor tal y como muestra la **figura 2.4**, con la herramienta PWE Band Solver Simulator (Ver **Anexo II. Band Solver**). A continuación, en la **tabla 2.1** se muestran los resultados para el modo TE y TM, los diagramas de bandas y los resultados en longitud de onda:

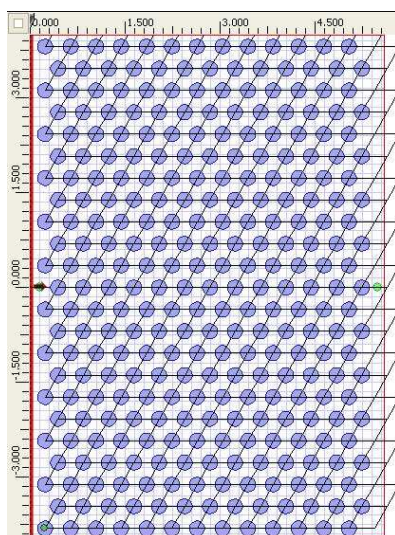


Figura 2. 4 Celosía hexagonal sobre la que se realiza el estudio de las bandas

Los resultados obtenidos se resumen en la tabla siguiente:

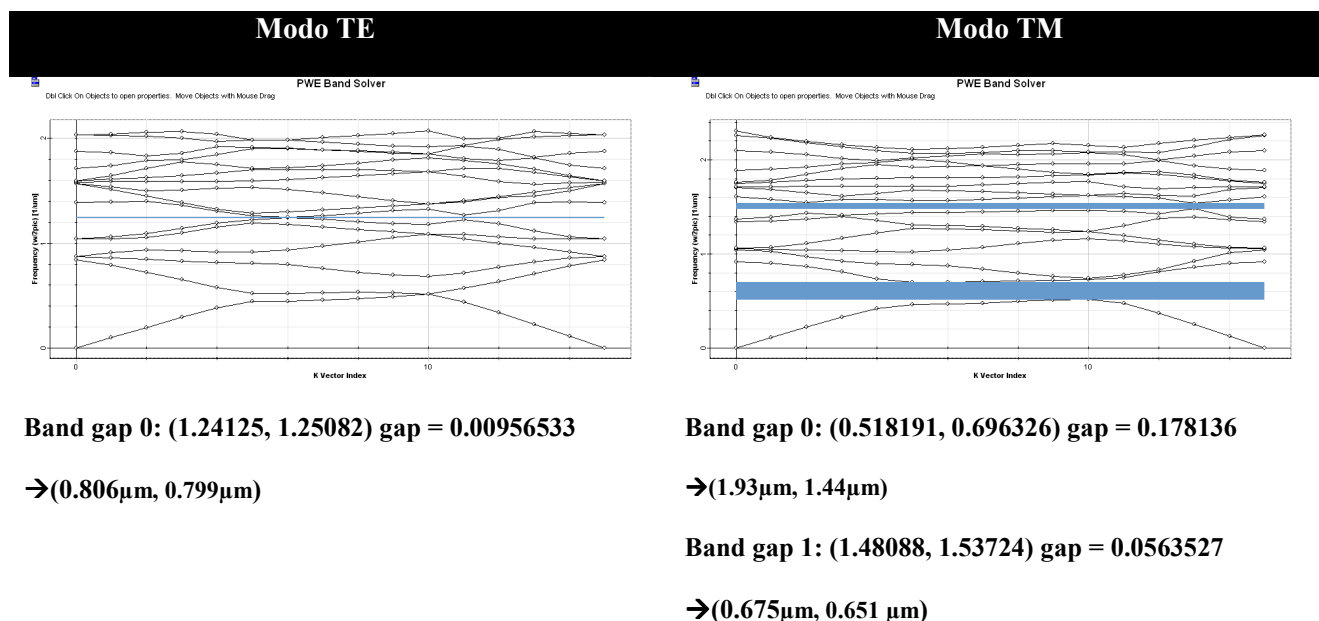


Tabla 2.1 Gaps obtenidos para la celosía de la figura 2.4

## Capítulo 2. Simulación de Sensores de Artículos

Según la **tabla 2.1**, se ve como la estructura muestra unos gaps considerables para el modo TM, mientras que para el modo TE el gap aparecido es muy pequeño. Tal y como se muestra, parece que existe un gap desde 1440nm hasta 1930nm, este resultado choca directamente con los resultados aparecidos en los artículos mencionados al principio, por lo que conviene hacer una comprobación simulando con un pulso gaussiano para comprobar que los gaps que aparecen son los que se dan en este caso.

Las siguientes simulaciones se hacen en dos dimensiones, con un pulso de perfil gaussiano en el tiempo y en el espacio, de forma que el espectro de ese pulso abarque completamente los gaps para comprobar si existe en realidad dicho gap:

La simulación se ha realizado utilizando polarización TM:

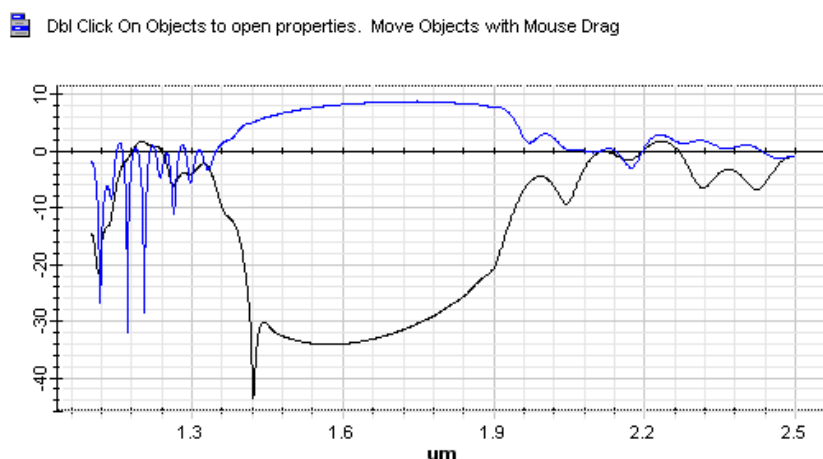


Figura 2. 5 Gap centrado en 1650nm aproximadamente

Como se puede comprobar en la **figura 2.5** los resultados obtenidos son correctos y se parecen a los calculados con el Band Solver. No parece que los resultados concuerden con los dados en el artículo, puesto que el dispositivo anulará las frecuencias cercanas a 1490nm, justo la longitud de onda de resonancia del sensor según el artículo. Se hace la misma prueba para el gap aparecido a longitudes de onda más bajas:

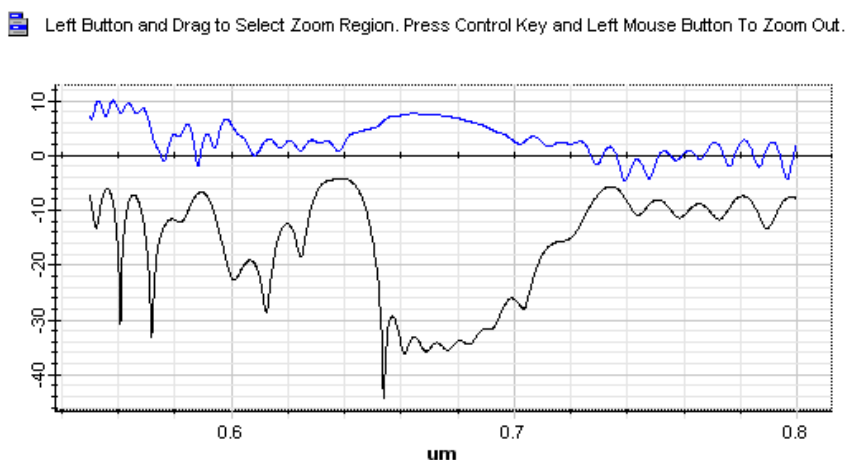


Figura 2. 6 Gap centrado en 670nm aproximadamente

Como sucede con el gap anterior, en la **figura 2.6** se muestra que se cumple lo obtenido con el Band Solver, en este caso el gap obtenido en la simulación es levemente más ancho que el calculado con el Band Solver.

### 2.1.2 Simulación Sensor.

En este apartado se llevará a cabo la simulación del sensor de la cavidad resonante cuyos parámetros se han especificado en el primer punto. La estructura introducida en el OptiFDTD es la siguiente, a la que se le han puesto varios puntos de recogida de datos.

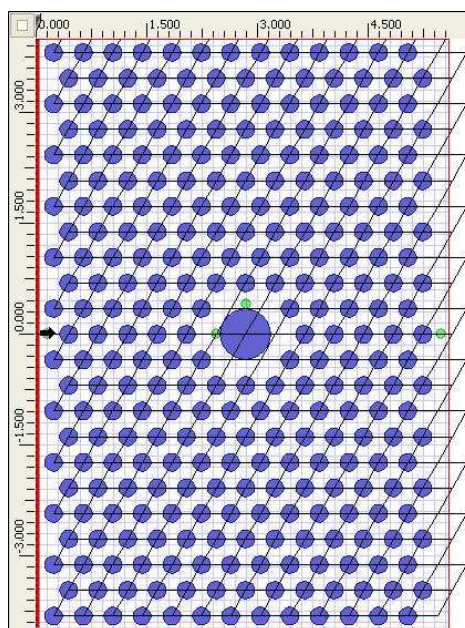


Figura 2. 7 Layout del sensor de microcavidad

Tras la comprobación de la existencia de un gap cubriendo la longitud de onda de resonancia dada en los artículos, se hace necesario hacer un barrido para localizar la frecuencia de resonancia del sensor.

#### a. Búsqueda de la Frecuencia de Resonancia.

Como se ha podido ver en el apartado del estudio de los diagramas de bandas, la estructura tiene un gap para la longitud de onda resonante mostrada en el artículo. De hecho, una rápida comprobación de este hecho se muestra en la **figura 2.8-a**, donde puede observarse como la señal de 1490nm es incapaz de atravesar tres columnas de agujeros (aproximadamente 1 $\mu$ m). La polarización utilizada es la TE, puesto que no muestra un gap como en el modo TM. Con un barrido en longitud de onda posterior, se consiguió determinar que la frecuencia de resonancia de esta estructura rondaba los 1300-1330nm, es decir, más de 150nm menos de la longitud de onda resonante del artículo. Después de un barrido más fino, se determinó que la longitud de onda a la que se obtenía mayor transmisión rondaba los 1320nm, en la **figura 2.8** puede verse una comparación entre los resultados obtenidos para 1490nm (a) y 1320nm (b), donde se muestra claramente la resonancia a 1320nm.

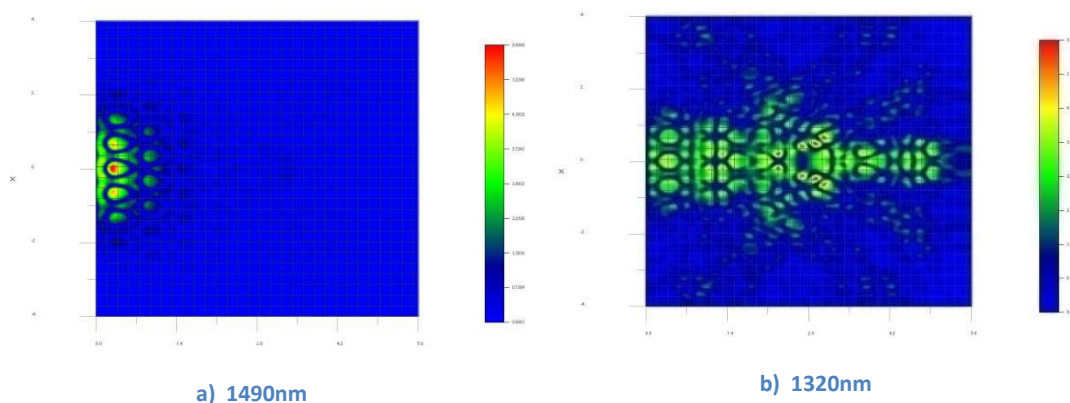


Figura 2. 8 Resonancia del sensor mediante simulación

En el dominio temporal esta situación se manifiesta claramente como era de esperar y como puede verse en la **figura 2.9**. Las señales recibidas en distintos puntos de la estructura son muy diferentes en un caso y en otro. En el caso en el que la fuente de luz es de 1490nm las señales recibidas son muy pequeñas, prácticamente nula en el punto final de la estructura, mientras que en el caso de la señal de 1320nm las señales recibidas llegan a superar a la señal recibida al inicio de la estructura, y la transmisión es mucho mayor que en el caso anterior.

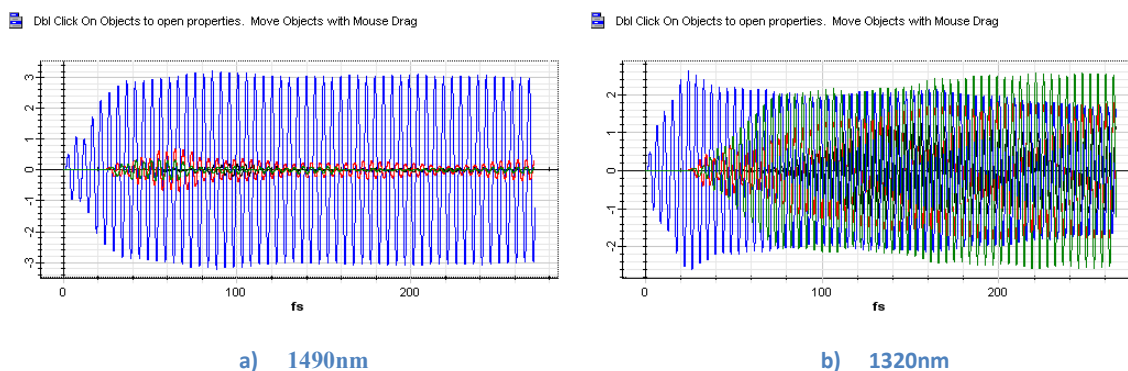
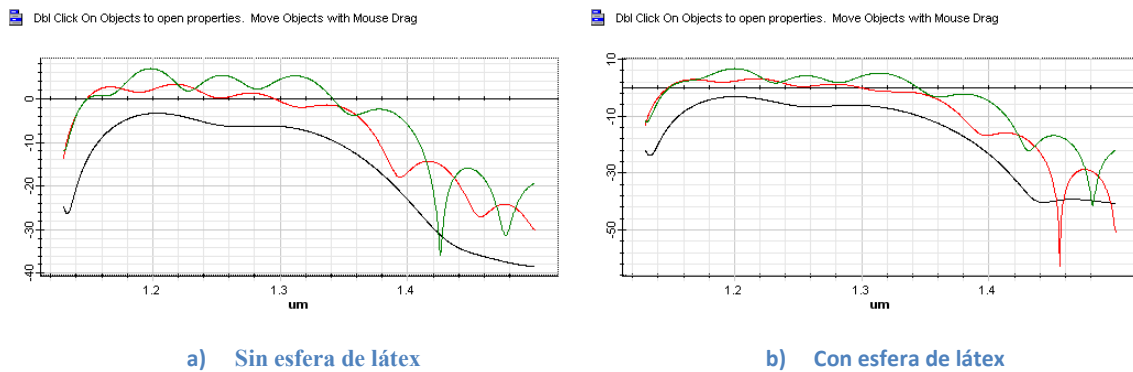


Figura 2. 9 Datos recopilados mediante el uso de puntos de observación

En las **figuras 2.9-a** y **2.9-b**, la línea azul es la onda recogida en el punto de observación situado frente a la fuente de luz a mitad de la estructura, mientras que la roja es la señal recibida en el centro de la cavidad, la verde es la señal recibida en el borde de la cavidad a la mitad de la estructura, y la negra es la señal recibida al final de la cavidad. Se comprueba como la señal en el borde de la cavidad llega a superar la amplitud de la fuente de luz en la **figura 2.9-b** debido a que entra en resonancia. También se comprueba como en la **figura 2.9-a** superior la fuente de luz alcanza una amplitud de 3 V/m, a pesar de que la fuente tiene una amplitud máxima de 2 V/m, esto es debido a que las reflexiones y la señal emitida tendrán una interferencia constructiva (o casi) en el punto de observación localizado al lado de la fuente de luz. En la **figura 2.9-b**, en cambio, se observa que hay un pico superior a 2 V/m en el punto cercano a la fuente de luz, para progresivamente ir descendiendo de esa amplitud, al contrario que en el punto en el borde de la cavidad, que va aumentando debido a la resonancia.

### b. Simulación 2D.

Tras la búsqueda de la longitud de onda de resonancia, y determinar ésta en aproximadamente 1320nm se procede a simular en dos dimensiones la respuesta del dispositivo a un pulso gaussiano cuya anchura espectral cubre un amplio rango de longitudes de onda. Lo que se esperaba obtener era una forma de peine en el espectro, típica de las cavidades Fabry-Perot. Por el contrario, los resultados obtenidos no muestran más que un ligero rizado del espectro, según la localización de los puntos de observación éste rizado puede ser mayor de 0dB, pero en general, los resultados obtenidos no son los deseados. En la **figura 2.10** pueden observarse los resultados obtenidos para cuando los puntos de observación están situados delante de la cavidad (línea roja), en el centro de la estructura encima de la cavidad (línea verde) y al final de la estructura (línea negra). La **figura 2.10-a** muestra los resultados obtenidos cuando la estructura no tiene ninguna partícula de látex, mientras que en la **figura 2.10-b** se ha puesto una partícula esférica de látex de 350nm de diámetro en la cavidad, tocando la pared de la misma. Pueden observarse diferencias entre ambas simulaciones, pero sin similitudes con respecto a los resultados ofrecidos en los artículos.



**Figura 2. 10 Efectos de la introducción de una esfera de látex**

A modo de resumen, las simulaciones realizadas en 2D no obtienen ningún resultado destacable, no coinciden con los resultados mostrados en los artículos [2.1] y [2.2]. Los resultados no muestran una resonancia Fabry-Perot de un modo claro, pero sí que muestran diferencias significativas entre la simulación realizada sin nada dentro de la microcavidad y con la esfera de látex dentro de la microcavidad. De todas formas, al no mostrar una frecuencia de resonancia cercana a la mostrada en los artículos se puede decir que los resultados no son los esperados.

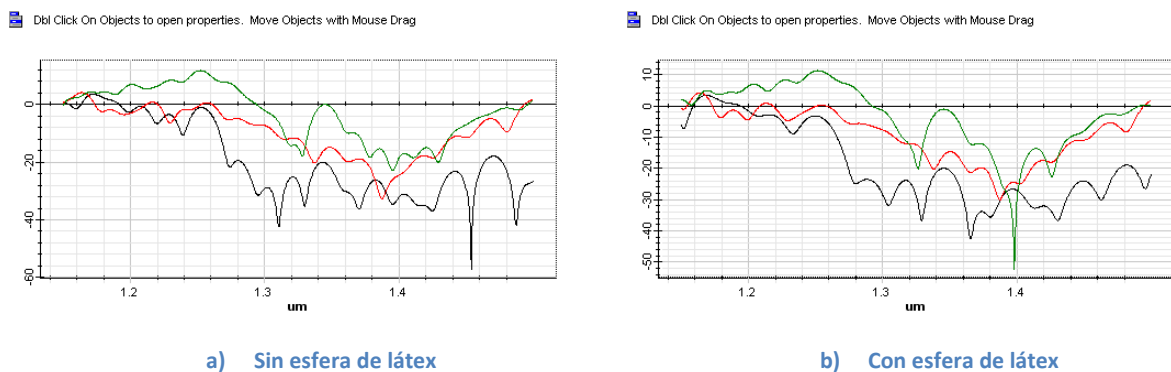
Estos resultados generan bastante desconcierto, que en un principio se achacan a que las simulaciones están realizadas en dos dimensiones, y en el artículo las simulaciones mostradas están realizadas en tres dimensiones. De todas formas, no se tiene información del grosor del chip de silicio ni del sustrato utilizado. A pesar de ello, para completar este apartado se procede a realizar las simulaciones en 3D.

### c. Simulación 3D.

Tras comprobar que las simulaciones en 2D no muestran gran coincidencia con los resultados mostrados en los artículos, se decide realizar varias simulaciones en 3D para comprobar si los resultados obtenidos de esta manera se aproximan más a los resultados experimentales de los artículos. A pesar de no tener información acerca del grosor de la oblea de silicio, se decide ponerle un grosor de 340nm, sobre un buffer de oxido de silicio,  $\text{SiO}_2$ . En la parte de arriba de la estructura se pone una capa de aire para evitar pérdidas debidas a las condiciones de contorno, puesto que al no poner esta capa el simulador hubiera tomado la parte de arriba como una capa infinita del material tocante a ese límite (**Anexo IV. Condiciones de Contorno y Modelos de Materiales**).

La simulación tiene los mismos parámetros y puntos de recogida de datos que en las simulaciones en 2D, sólo que los puntos de observación se sitúan ahora a una altura de 170nm, a mitad de altura del chip de silicio.

En la **figura 2.11** pueden observarse los resultados obtenidos con esta simulación.



**Figura 2. 11 Efectos en las simulaciones de la introducción de una esfera de látex en la microcavidad**

A la vista de los resultados obtenidos, se puede decir que las simulaciones realizadas no coinciden con los resultados previstos. La **figura 11-a** y **b** muestran los resultados de la simulación en 3D sin ninguna partícula de látex y con una partícula de látex de 350nm de diámetro pegada a la pared de la microcavidad respectivamente. También se ha realizado una simulación centrando el pulso gaussiano en 1490nm, para ver si se alcanza un estado resonante del dispositivo, pero los resultados (que se omiten en este apartado), no mostraron gran coincidencia con lo esperado.



### 2.2 Sensor 2D De Guía Onda

Se probaron las propiedades de guiado del sensor de guía onda que aparece en el artículo “*Specific detection of proteins using photonic cristal waveguides*” [2.3] de S. C. Buswell y otros. La estructura en cuestión se muestra en la **figura 2.12**:

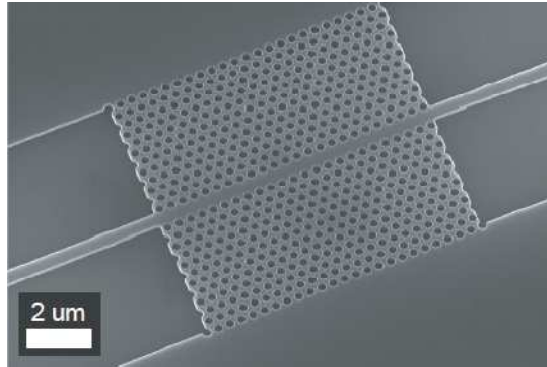
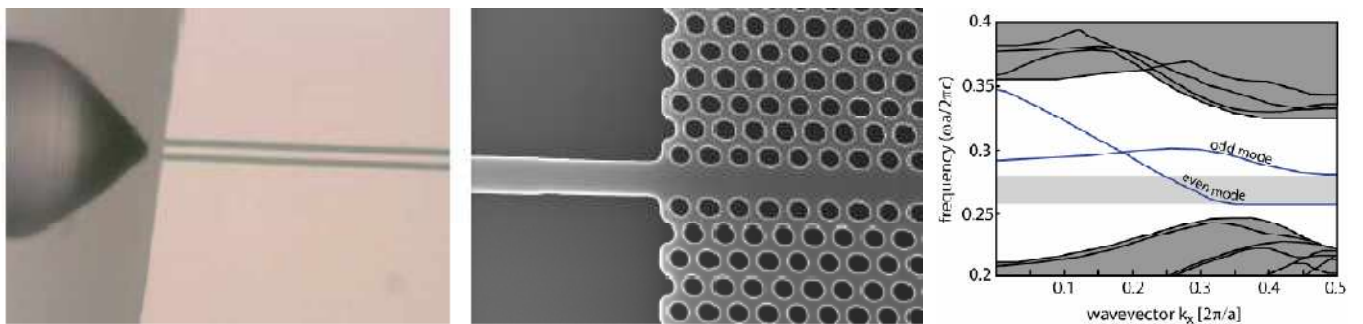


Figura 2. 12 Sensor 2D de guía onda de agujeros de aire sobre silicio extraído de [2.3]

Según el artículo, la celosía hexagonal de agujeros de aire sobre la oblea de silicio provoca el gap de la **figura 2.13-b**, en el que se muestra el hueco que hay entre un modo par y otro impar. La apertura de una línea de defecto en esta malla tendrá como resultado una guía de onda monomodo, en la que habrá un gran confinamiento de la luz. Por otra parte, las características del dispositivo fabricado fueron diseñadas para que la longitud de onda de corte del modo guiado más bajo cayera aproximadamente en una longitud de onda de 1570nm, por tanto, la constante de red (en el artículo  $\Lambda$ ) es de  $\Lambda = 406\text{nm}$  con un radio del agujero  $r = 0.38\Lambda$ . La longitud total del la guía es de 24 agujeros, es decir,  $24\Lambda$ . El acoplamiento de la luz a la guía de cristal fotónico se hace con una guía strip que reduce su anchura desde  $2\mu\text{m}$  hasta  $450\text{nm}$ , tal y como se muestra en la **figura 2.13-a**, a ambos lados del dispositivo, para reducir el desacoplo de modos entre la guía strip y la guía de cristales fotónicos.



a) Guía strip para reducir el desacoplo de la luz a la guía

b) Diagrama de bandas mostrado en [2.3]

Figura 2. 13 Guía strip y diagrama de bandas del sensor

Los sensores de Guía Onda de Cristales Fotónicos son los más sensibles a cambios en el índice de refracción cercano a su superficie. La simulación del artículo fue llevada a cabo con el método 2D FDTD (Finite Difference Time Domain) de índice de refracción efectivo. La estructura fue simulada utilizando pasos de  $10\text{nm}$ , y con un paso temporal de  $0.024\text{fs}$ . Se

normalizó la respuesta al pulso de entrada, y se obtuvo el espectro de transmisión para cuando los agujeros estaban llenos de aire y de agua. La longitud de onda de corte de la guía tuvo una variación de 31nm para un aumento de índice de refracción de 1 a 1.33, tal y como se muestra en la **figura 2.14**.

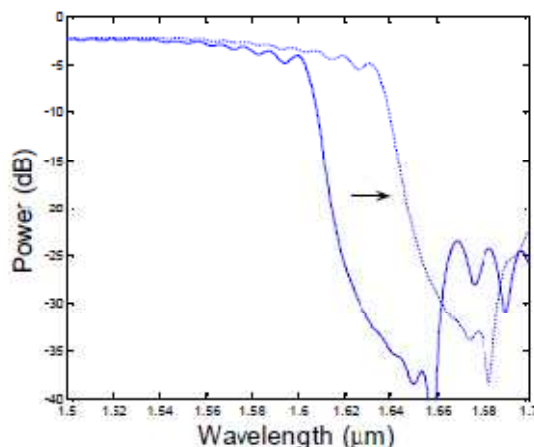


Figura 2. 14 Variación en la frecuencia de corte de la guía para un índice de refracción de  $n = 1$  y  $n = 1.33$

Después de las simulaciones en el ordenador, los autores del artículo procedieron a medir experimentalmente la variación de la longitud de onda de corte en el dispositivo fabricado, dando como resultado un desplazamiento de 29nm hacia longitudes de onda superiores cuando los agujeros contenían agua de-ionizada, es decir, para un cambio en el índice de refracción de 0.33 RIU (Unidades de Índice de Refracción). Este desplazamiento está acorde con lo que se había predicho en la **figura 2.14**.

En el artículo se hace mención a que la velocidad de grupo del modo de la guía aumenta dramáticamente con la longitud de onda, cayendo a cero a la longitud de onda de corte. El aumento de las pérdidas asociadas a una velocidad de grupo baja en una cubierta de material con pérdidas hace difícil distinguir la longitud de onda de corte. Por esta razón, se utilizó una longitud de onda de referencia alternativa (punto A en la **figura 2.15**). Las oscilaciones Fabry-Perot debidas a la formación de una onda estacionaria entre los bordes cortados de la guía y la propia guía de cristales fotónicos fueron filtradas para mejorar los resultados presentados en el artículo.

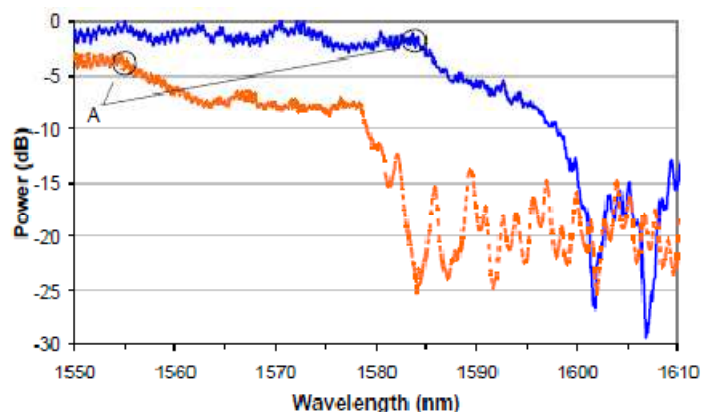


Figura 2. 15 Punto de referencia del sensor



La detección de proteínas sin marcadores se consiguió midiendo la transmisión espectral cerca del corte, primero para cuando se había inmovilizado una capa de biotina, y luego sobre la que se añadían moléculas de estreptavidina (las cuales se unen a la biotina). Como se esperaba, la longitud de onda de corte se desplaza tras el enlazamiento de la biotina y la estreptavidina 0.86nm hacia longitudes de onda mayores (**figura 2.16**). La capa de estreptavidina era de tan sólo 2.5nm con un índice de refracción estimado de 1.4.

Además en el artículo se concluye que tal variación de la longitud de onda de corte se debía a específicamente a la reacción deseada, en lugar de reacciones no.

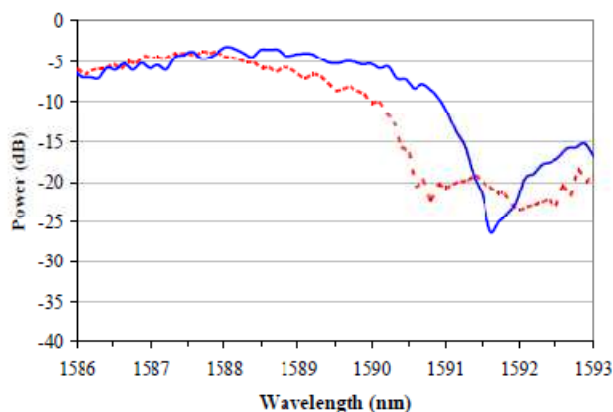
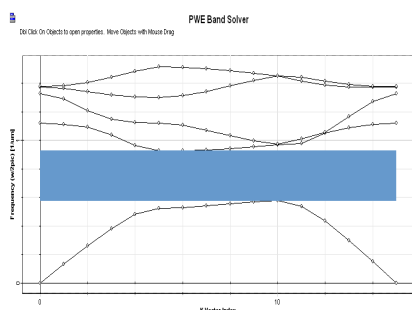


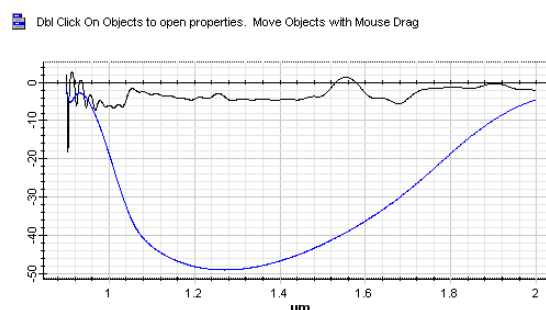
Figura 2. 16 Resultados del sensor en la medición de sustancias biológicas

### 2.2.1 Diagrama de Bandas.

En primer lugar se procede a determinar la situación de los gaps de la estructura sobre la que se crea una guía de cristales fotónicos. Esta estructura es una celosía hexagonal de agujeros sobre silicio, y cuyos parámetros fueron expuestos al principio del apartado anterior ( $\Lambda = 406\text{nm}$ ,  $r = 0.38\Lambda$ ,  $L = 24\Lambda$ ), sin la línea de defecto. Tal y como era de esperar por ser una estructura de silicio con agujeros de aire, únicamente se abre un gap para el modo TM, situado aproximadamente entre los 1067nm y los 1720nm. La comprobación mediante la simulación de la transmisión de un pulso gaussiano a través de la estructura muestra claramente la aparición de dicho gap en el espectro, alcanzando valores de rechazo de hasta -50dB, tal y como puede comprobarse en la **figura 2.17-a y b**.



a) Cálculo de los diagramas de bandas de la celosía hexagonal



b) Comprobación de la posición del gap

Figura 2. 17 Resultados del estudio del diagrama de bandas de la celosía hexagonal

Por tanto, la apertura de una línea de defecto en la celosía hexagonal debería confinar adecuadamente el haz de luz. El siguiente paso será el de simular dicha estructura en 2D para comprobar si coinciden los resultados con el artículo [2.3].

### 2.2.2 Simulación Sensor.

En el estudio llevado a continuación, los datos se han obtenido directamente del simulador para mostrar a continuación las gráficas hechas con Excel. El motivo es que al realizar las simulaciones separadas para cada índice de refracción, se obtendrían varias gráficas dificultando su comparación. El agrupar los resultados de varias simulaciones en las mismas gráficas de Excel se ha hecho únicamente con el propósito de facilitar la comparación entre distintas simulaciones.

#### a. Simulación 2D.

Estas simulaciones se han realizado siguiendo las especificaciones dadas en el artículo y expuestas en el primer punto. La polarización de la fuente de luz fue TE, y se empleó un pulso gaussiano con un ancho de banda suficiente para cubrir las longitudes de onda a estudio. Los resultados obtenidos no concuerdan con los del artículo, aunque sí que muestran la misma tendencia que en él, mostrando por ejemplo para unas pérdidas de -15dB una separación de 34nm entre la transmisión con los agujeros llenos de aire y llenos de agua. En la simulación llevada a cabo los resultados están desplazados unos 30nm hacia longitudes de onda más altas, pero se desconoce el motivo, probablemente esté relacionado con las condiciones de contorno tomadas. En la **figura 2.18** se muestran los resultados de la simulación mencionados anteriormente.

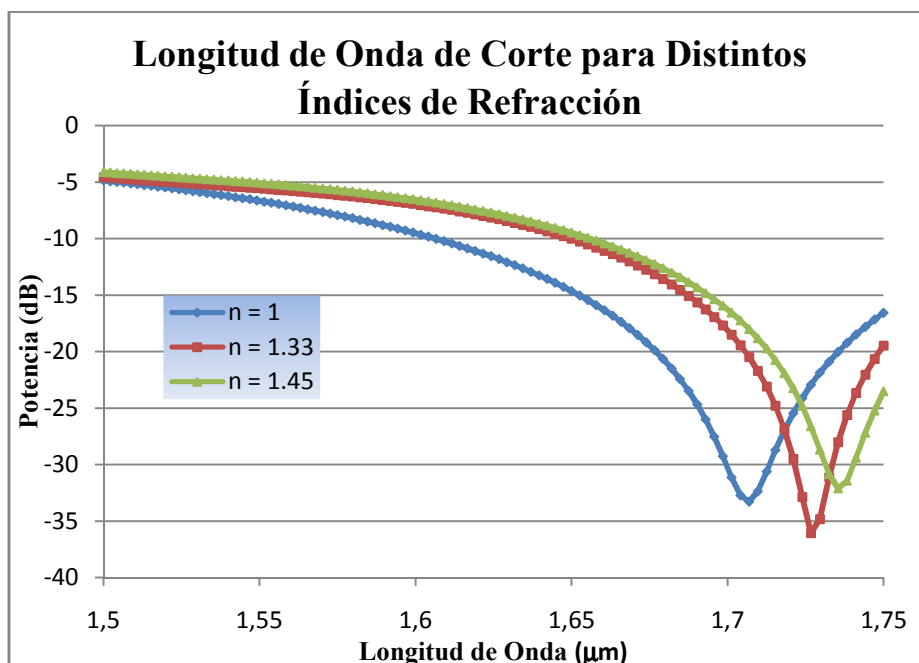


Figura 2. 18 Longitud de onda de corte para distintas simulaciones

La gráfica muestra un decaimiento mucho menos abrupto que el que dan en el artículo, con lo que es difícil considerar un punto de referencia. Si se considerara la longitud de onda de corte del artículo (aprox. 1610-1620nm), se obtiene aproximadamente -11.3dB, dando como resultado un desplazamiento de 41.6nm, demasiado frente a los 31nm del artículo. Si se marca como referencia una potencia transmitida de -15dB, se obtiene un desplazamiento menor, de 34.8nm, más acorde con los datos dados en el artículo. Marcando como referencia -20dB, se obtiene un desplazamiento aún menor que el anterior, de tan solo 27.6nm, más cercano a los resultados experimentales mostrados en el artículo, por tanto, aunque es apreciable la diferencia en el corte para ambas situaciones y la tendencia es similar a la mostrada en el artículo, los resultados no concuerdan exactamente con los ofrecidos en las simulaciones de los articulistas.

El método utilizado es el mismo que el que usa el paquete software OptiFDTD 8.0, por tanto, las diferencias aparecidas entre ambas simulaciones pueden deberse a las condiciones de contorno utilizadas en ambas simulaciones. En el artículo se menciona que las condiciones de contorno utilizadas en las simulaciones eran las de Mur (Mur's Boundary Conditions, ABC), mientras que el paquete OptiFDTD y en las simulaciones realizadas fueron las condiciones de contorno APML (Anisotropic Perfectly Matched Layers). Según se pudo comprobar, la utilización de las condiciones PML de Berenger es mucho más común entre los investigadores actualmente que las condiciones de contorno ABC de Mur. Para más información se recomienda la lectura del **Anexo IV. Condiciones de Contorno y Modelos de Materiales**.

Para finalizar la comparación entre los resultados descritos por el artículo y los resultados obtenidos con las simulaciones propias, se procede a realizar una simulación en tres dimensiones.

### **b. Simulación 3D.**

En esta ocasión se pretende realizar una simulación en 3D de la estructura para comprobar si el comportamiento mostrado por el simulador, si se obtienen resultados similares a los mostrados experimentalmente o no. El dispositivo, una oblea de silicio de 340nm de grosor con un patrón de agujeros de aire, está sobre una capa de óxido de silicio ( $\text{SiO}_2$ ) de 1 $\mu\text{m}$  de grosor. Como se mencionó antes, para evitar el desacoplamiento de la luz a la guía de cristal fotónico, la luz se acopla desde la fibra óptica con una guía strip que reduce su anchura desde 2 $\mu\text{m}$  hasta 450nm, **figura 2.13-a**, a ambos lados del dispositivo. A pesar de que la estructura tiene esta parte de acoplamiento, en el simulador sólo se mete la guía de cristales fotónicos, puesto que meter la parte de la guía strip a ambos lados del dispositivo no hará más que hacer mucho más pesada la simulación 3D, tanto en tiempo como en memoria requerida.

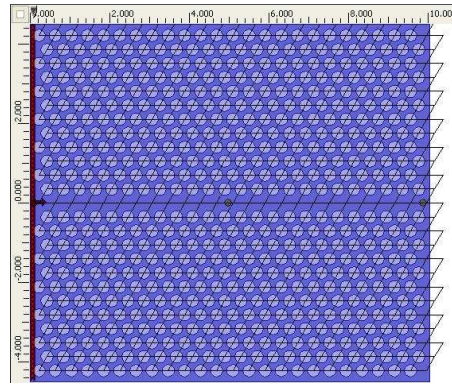


Figura 2. 19 Layout de la guía de cristales fotónicos usada para las simulaciones

Para la fuente de luz se tiene un pulso de perfil gaussiano tanto espacial como temporalmente, cuyo ancho de banda cubre un amplio rango de longitudes de onda. Así se conseguirá observar el corte de la guía y comprobar si los resultados experimentales dados en el primer punto. Para la recogida de datos, se decide obtenerlos de dos formas diferentes, primero usando puntos de observación, situados al final de la guía de  $10\mu\text{m}$  de longitud, a una altura de  $170\text{nm}$  (posición central de la guía), y con áreas de observación, cubriendo completamente el área transversal de la guía.

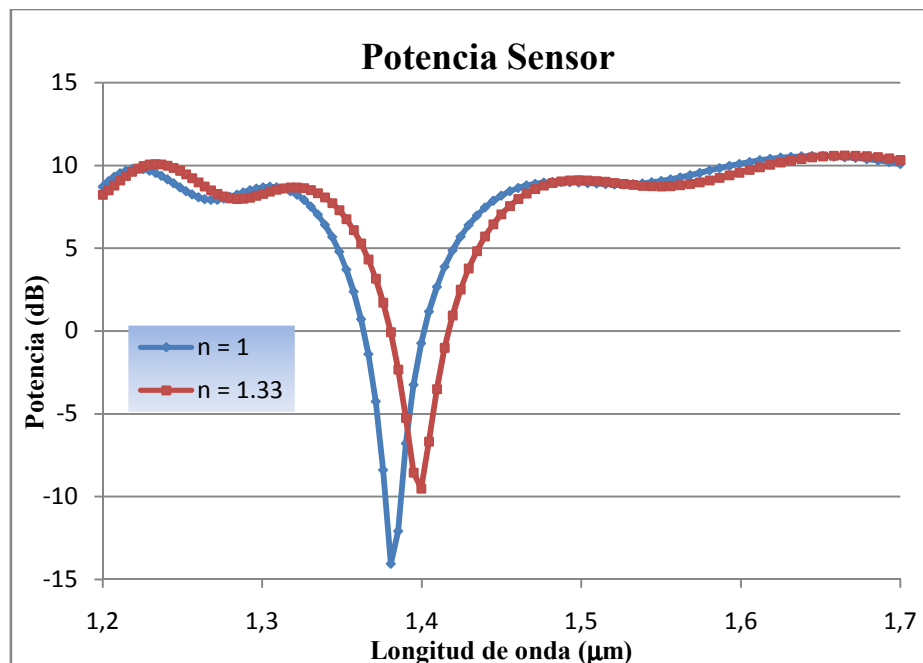


Figura 2. 20 Potencia captada por los puntos de observación

Los resultados de la simulación mostrados en la **figura 2.20** no muestran similitudes con los resultados mostrados en el artículo ni con los resultados de la simulación en dos dimensiones, pero se desconocen las causas exactas de esto. En concreto, las simulaciones realizadas en tres dimensiones muestran un gap bastante abrupto en torno a los  $1400\text{nm}$ , cosa que no había aparecido anteriormente, mientras que no se observa el corte de la guía en ningún momento. Estos resultados deberían ser similares a los experimentales mostrados en el artículo,

pero no coinciden en ninguna característica. De todas formas, la simulación muestra un desplazamiento del gap de unos 20nm para una diferencia de índice de refracción de 0.33 RIU.

Una de las características más llamativas de esta simulación es la de dar resultados por encima de 0dB para toda la banda estudiada, algo que no debería ser posible, y que no es lógico por tratarse de un dispositivo pasivo que además sufre pérdidas. Es algo que se ha observado en simulaciones que se mostrarán más adelante en este trabajo, y que se achaca al uso de puntos de observación y fuentes de luz anchas (aunque en este caso la fuente es bastante estrecha, acoplándose perfectamente a la guía). Por lo que se cree, en el punto de observación incide luz de un área más grande, por lo que puede dar resultados mayores a los de la emisión de la fuente de luz. Esto se puede solucionar utilizando áreas de observación, en las que en vez de tener un punto infinitamente pequeño, se tiene un área (en este caso de la anchura y altura de la línea de defecto), por lo que la potencia no se concentra en el punto de observación, si no que se distribuye a lo largo del área dando resultados más realistas.

En la siguiente gráfica (**figura 2.21**) se muestran los resultados de las mismas simulaciones en las que se han obtenido los datos a través de las mencionadas áreas de observación. Los resultados no muestran en ningún caso un corte marcado en torno a los 1580nm como en los resultados del artículo, pero si muestran un gap en torno a los 1400nm, que se desplaza hacia longitudes de onda superiores al introducirle un material de un índice de 1.33 en los agujeros.

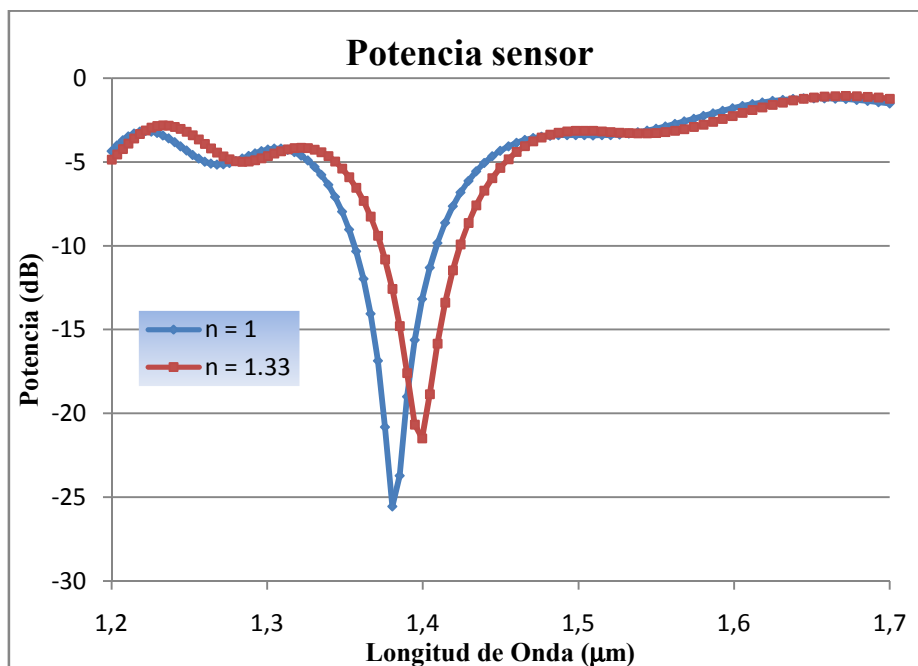


Figura 2. 21 Potencia captada por áreas de observación

La diferencia entre las **figuras 2.20 y 2.21** radica simplemente en la potencia mostrada entre ambas, puesto que siendo iguales en la forma. En la **figura 2.21** se obtienen aproximadamente 12dB menos que en la **figura 2.20**. Este resultado es más lógico que el anterior, **por lo que se recomienda usar áreas de observación en simulaciones en 3D en vez de puntos de observación**, puesto que estos deberán ser compensados posteriormente.

### 2.3 Conclusiones.

A la vista de las simulaciones de los dos sensores estudiados en este capítulo, destaca que las simulaciones no hayan conseguido obtener resultados similares a los de los artículos. Por un lado, en el sensor de la microcavidad resonante no se obtiene una frecuencia de resonancia cercana a la mostrada en el artículo, consiguiendo unos picos de resonancia escuetos aproximadamente en los 1320nm. Por otra parte, en el sensor de la guía de cristales fotónicos sí que se consiguen resultados similares a los mostrados en las simulaciones del artículo para las simulaciones en 2D, aunque algo desplazados a longitudes de onda mayores, pero no se obtienen resultados similares cuando las simulaciones se realizan en 3D.

En este punto, solo cabe preguntarse si las simulaciones realizadas reflejan la realidad adecuadamente. Tal vez haya sido la falta de información en los artículos sobre condiciones de contorno, o sobre el grosor de la oblea de silicio en el de la microcavidad.

## Capítulo 2. Simulación de Sensores de Artículos

---

Bibliografía para el Capítulo 2. Simulación de Sensores de Artículos.

[2.1] “Two-dimensional Si photonic cristal microcavity for single particle detection”, M. R. Lee y Philippe Fauchet.

[2.2] “Nanoscale microcavity sensor for single particle detection”, M. R. Lee y Philippe Fauchet.

[2.3] “Specific detection of proteins using photonic cristal waveguides”, S. C. Buswell y otros

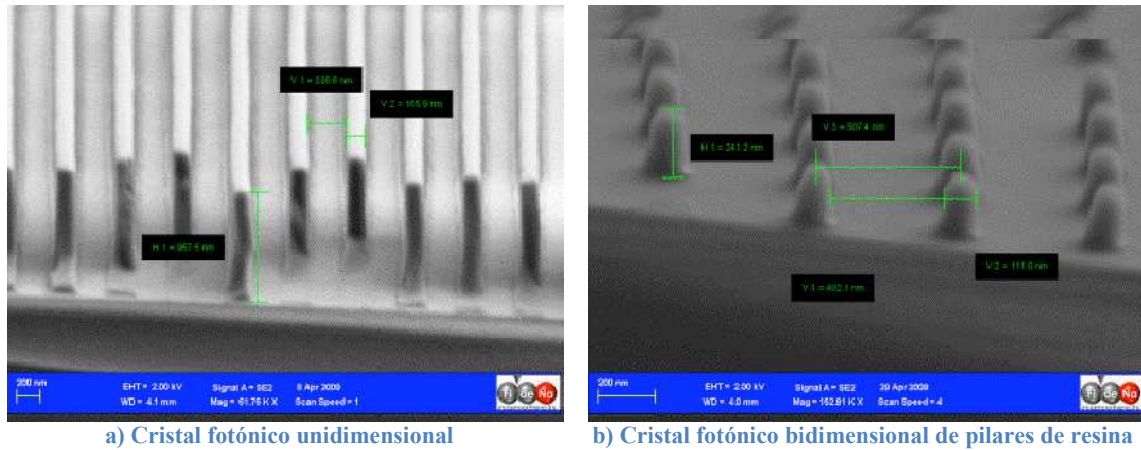




## [Capítulo 3. Red de Difracción en Transmisión]



En este capítulo se procederá al estudio de una red de difracción mediante el software **OptiFDTD 8.0**. La red estudiada ha sido fabricada mediante nanolitografía UV sobre resinas poliméricas, un ejemplo de cristal fotónico unidimensional fabricado con esta técnica puede verse en la **figura 3.1-a**, en la **figura 3.1-b** se muestra un cristal fotónico bidimensional creado también con la misma técnica.

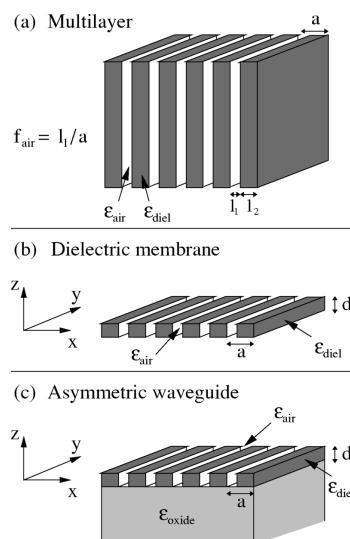


**Figura 3. 1 Cristales fotónicos creados mediante la técnica de nanolitografía UV sobre resinas poliméricas, imágenes FESEM cedidas por el FideNa**

La red de difracción es un cristal fotónico unidimensional, del que se hará un breve resumen teórico en este capítulo sobre los distintos tipos de guías unidimensionales y las características de cada una. Posteriormente se realizará un estudio de los diagramas de bandas de la estructura estudiada en función del índice de refracción, y para finalizar se mostrarán los resultados de las simulaciones realizadas.

### 3.1 Red de difracción de Bragg

Los cristales fotónicos unidimensionales se pueden enmarcar en tres tipos diferentes, tal y como puede verse en la **figura 3.2**.



**Figura 3. 2 Tipos de cristales fotónicos unidimensionales, imagen obtenida de [3.1]**

Una de las cuestiones más importantes de los cristales fotónicos, y en este caso de los cristales fotónicos unidimensionales, radica en el problema de la *línea de luz* (*light-line*). Solo los modos fotónicos que estén debajo de la línea de luz de los materiales del cristal fotónico serán los verdaderamente guiados y estacionarios, mientras que los que caigan por encima de la línea de luz en la primera zona de Brillouin serán acoplados a modos de fuga sujetos a pérdidas de radiación [3.1].

En los cristales fotónicos unidimensionales, la función dieléctrica varía a lo largo del eje de propagación  $z$ ,  $\varepsilon(z)$ , por lo que para este caso se hablará del vector de onda  $k$  como si fuera el vector  $k_z$ , puesto que en realidad es el único importante. De este modo, se calcula la línea de luz para un cristal fotónico multicapa (**figura 3.2-a**) de la siguiente manera [3.2].

$$\omega(k) = \frac{ck}{\sqrt{\varepsilon}}$$

La estructura periódica del cristal genera la reflexión de la luz para determinadas longitudes de onda, no permitiendo así su transmisión en ninguna dirección posible. Este rango de longitudes de onda en la que no está permitida la transmisión se conoce como **gap fotónico** (ver **Anexo II. Band Solver**). Para estructuras unidimensionales como las de la **figura 3.2-a** el cálculo del tamaño del gap y de la frecuencia central de este es conocida, aunque inicialmente estas características no son demasiado importantes puesto que son escalables con la constante de red, sí que es importante poder conocer el **ratio anchura del gap–frecuencia central del gap** (**gap-midgap ratio**, siendo  $\Delta\omega$  el tamaño del gap y  $\omega_m$  la frecuencia central del mismo), puesto que aunque sean escalables este ratio se mantiene constante. Es por este motivo, la escalabilidad de los gap y sus frecuencias centrales, que los diagramas de bandas en los que se muestran los gaps fotónicos usan ejes adimensionales, siendo  $\omega a/2\pi c$  para el eje de las frecuencias y  $ka/2\pi$  para el vector de onda.

En el caso de los cristales fotónicos multicapas (alternándose dos materiales diferentes) el cálculo del gap-midgap ratio es difícil. El caso general requiere del cálculo numérico para hallarlo, pero existen dos casos particulares en los que se puede aproximar este cálculo, el caso en el que el contraste entre las constantes dieléctricas es bajo, y el caso en el que se cumple que la banda creada esta maximizada, a este tipo de cristal fotónico multicapa se le llama **quarter-wave stack** (pila de cuarto de onda).

- **Bajo contraste de constantes dieléctricas**

Considerando que los dos materiales del cristal fotónico multicapas tienen una constante dieléctrica de  $\varepsilon$  y de  $\varepsilon + \Delta\varepsilon$  y un tamaño de las capas de  $a - d$  y  $d$  respectivamente, y considerando o que el contraste de las constantes dieléctricas es débil ( $\Delta\varepsilon/\varepsilon \ll 1$ ) o que la anchura  $a/d$  es pequeña, entonces la relación gap-midgap se puede aproximar con la siguiente ecuación.

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_m} \approx \frac{\Delta\varepsilon}{\varepsilon} \cdot \frac{\sin(\pi d/a)}{\pi}$$

- **Quarter-Wave Stack**

Para el caso **quarter-wave stack**, tomando los índices de refracción ( $\sqrt{\varepsilon}$ )  $n_1$  y  $n_2$  y una anchura de capas de  $d_1$  y  $d_2 = a - d_1$  respectivamente, se tiene que para una incidencia de la luz normal al cristal el gap creado se maximiza cuando se cumple que  $d_1 n_1 = d_2 n_2$ , o

equivalentemente  $d_1 = an_2/(n_1 + n_2)$ . Para este caso específico se tiene que la frecuencia central del gap es

$$\omega_m = \frac{n_1 + n_2}{4n_1n_2} \cdot \frac{2\pi c}{a}$$

La correspondiente longitud de onda del vacío  $\lambda_m = 2\pi c/\omega_m$  satisface la relación  $\lambda_m/n_1 = 4d_1$  y  $\lambda_m/n_2 = 4d_2$ , que significa que las capas individuales tienen exactamente un cuarto de onda de anchura. En este caso, en el que se maximiza la anchura del gap, el ratio gap-midgap viene definido con la siguiente ecuación.

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_m} = \frac{\pi}{4} \cdot \arcsin\left(\frac{|n_1 - n_2|}{n_1 + n_2}\right)$$

### Frecuencia de corte

Una de las características más interesantes para utilizar los cristales fotónicos a modo de sensor consiste en la variación de la frecuencia de corte de los modos guiados (del modo más bajo concretamente) en función de la variación del índice de refracción de los materiales a sensar. Al tener capas de resina polimérica que se alternan con capas de aire en nuestro caso, conviene indicar el modo de calcular el índice de refracción efectivo de la red.

$$\varepsilon_{eff} = f_{air}\varepsilon_{air} + (1 - f_{air})\varepsilon_{diel}$$

Esta ecuación sirve tanto para modos TE como TM, siendo  $f_{air}$  la fracción de aire de la red,  $\varepsilon_{air} = 1$  la constante dieléctrica del aire y  $\varepsilon_{diel} = 1.635$  la constante dieléctrica de la resina.

- **Dielectric Membrane**

En el caso de la membrana dieléctrica el modo de orden más bajo se calcula con esta ecuación, aunque para este caso el modo de orden más bajo corresponde con el modo de segundo orden [3.1].

$$\frac{\omega_c a}{2\pi c} = \frac{a}{2d\sqrt{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_{air}}}$$

- **Asymmetric Waveguide**

El cálculo de la frecuencia de corte para los modos TE y TM de orden más bajos para una guía asimétrica sobre un sustrato de óxido (u otro material) se realiza con la siguiente ecuación [3.1].

$$\frac{\omega_c a}{2\pi c} = \frac{a}{2d\sqrt{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_{air}}} \left[ m + \frac{1}{\pi} \arctan\left(r \frac{\sqrt{\varepsilon_{oxide} - \varepsilon_{air}}}{\sqrt{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_{oxide}}}\right) \right]$$

Donde  $r = 1$  para modos TE,  $r = \varepsilon_{eff}/\varepsilon_{air}$  para modos TM, y  $m \geq 0$  es un número entero.

### 3.2 Diagramas de bandas

A continuación se procederá a realizar un estudio de los diagramas de bandas de la red de difracción en relación a la anchura de las columnas con la constante de red. Las primeras simulaciones se harán en 2D, alternando la resina polimérica y aire, y más tarde se procederá al estudio de los diagramas de bandas resultantes de alternar la resina y otro material de distinto índice de refracción. El cálculo de los diagramas de bandas se ha hecho para la polarización TE.

Los gaps son calculados con el paquete software **OptiFDTD 8.0** que tiene una herramienta para calcular los diagramas de bandas optimizada para calcular los gaps de estructuras de cristales fotónicos. Dicho cálculo se hace con el método Plane Wave Expansion (PWE) con la herramienta PWE Band Solver Simulator (Ver **Anexo II. Band Solver**).

El simulador obtiene las bandas y las muestra en una ventana, estas bandas aparecen del modo en el que se muestra a continuación (**figura 3.3**).

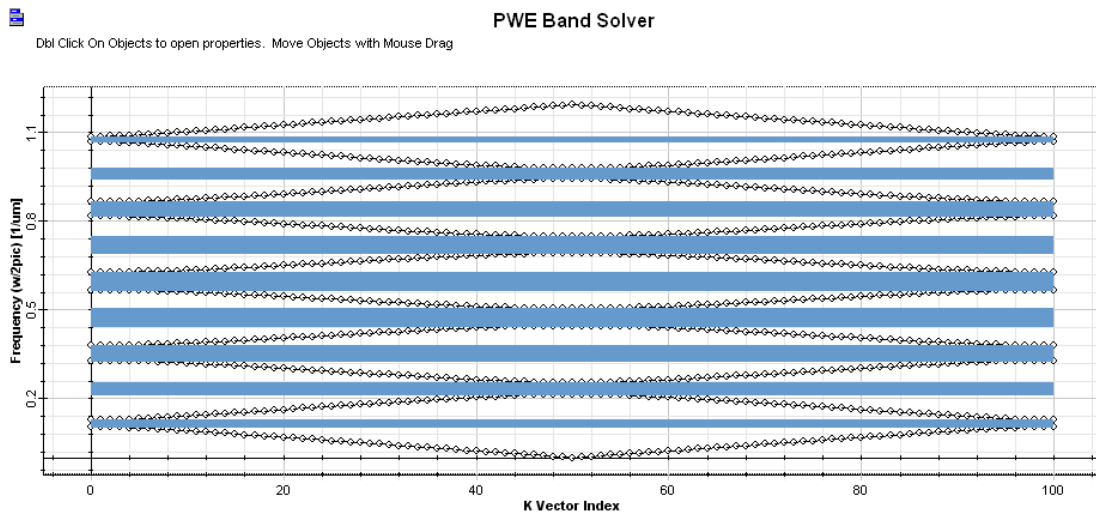


Figura 3.3 Diagrama de bandas calculado con la herramienta PWE Band Solver Simulator

Los gaps resultantes del cálculo del diagrama de bandas se muestran en una ventana adyacente (**figura 3.4**).

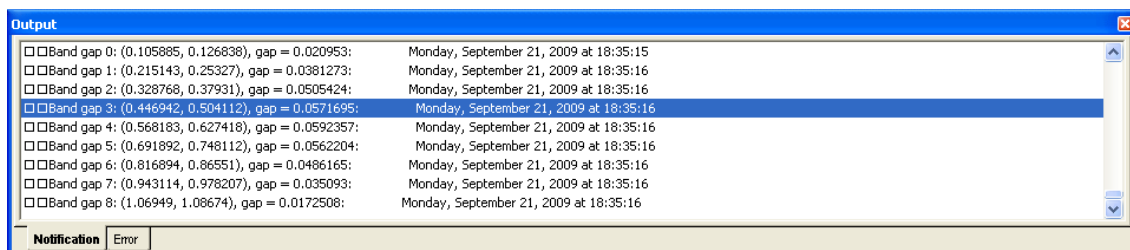


Figura 3.4 Gaps calculados con la herramienta PWE Band Solver

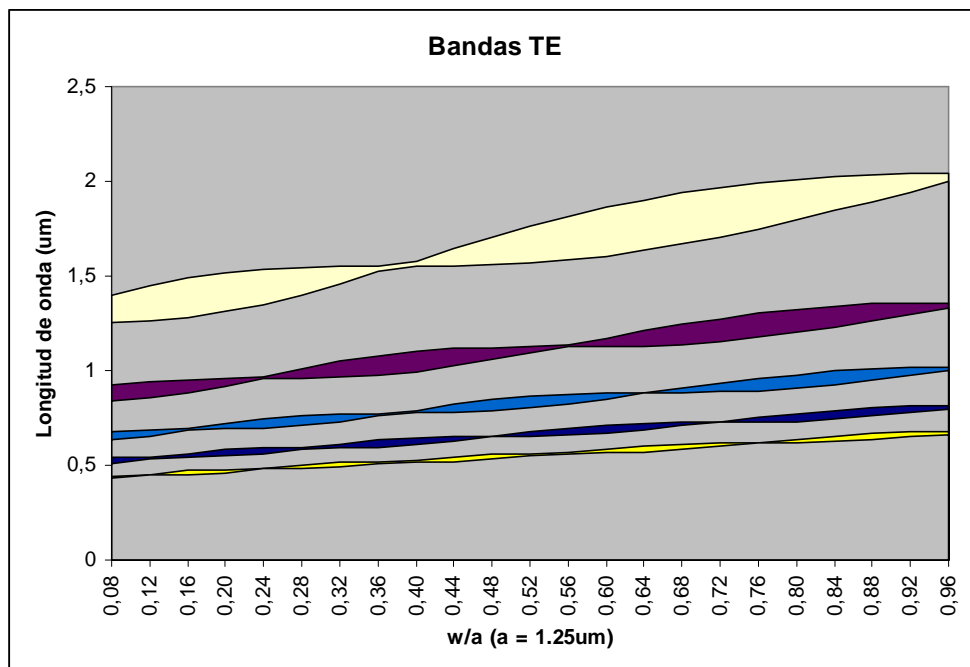
Los resultados de los gaps calculados de esta forma son los utilizados para el estudio de las bandas que se realizará en este apartado.

- **Estudio de los diagramas de banda en función de la relación  $w/a$**

En este punto se realizara un estudio de la variabilidad de los gaps de un cristal fotónico unidimensional en función de la relación columna/constante de red ( $w/a$ ). La relación  $w/a$  muestra la proporción de resina polimérica y aire en el cristal fotónico.

En la **figura 3.5** se muestra como varían los gaps en longitud de onda y anchura con respecto al aumento de la anchura de la columna de la red de difracción. Se observa que al aumentar la anchura de las columnas los gaps se desplazan hacia longitudes de onda superiores, a la vez que se observa que la anchura de los gaps varía de una forma que se podría considerar periódica.

En el gráfico de la **figura 3.5** se observa que los gaps siguen manteniendo una anchura considerable para grosores de columna grandes. La variación de la anchura de los gaps tiene máximos y mínimos, de una forma que se podría considerar periódica como se ha mencionado antes. La localización de estos mínimos y máximos de los gaps no se dan en los mismo puntos para todos los gaps, su localización depende de cada una de los gaps individualmente.



**Figura 3. 5 Variabilidad de los gaps calculados en longitud de onda frente a la relación anchura columna/constante de red**

En la **figura 3.6** se muestran los gaps cercanos al espectro de la luz visible, puesto que las fuentes de luz que se utilizaran en simulaciones futuras serán de este rango de longitudes de onda.

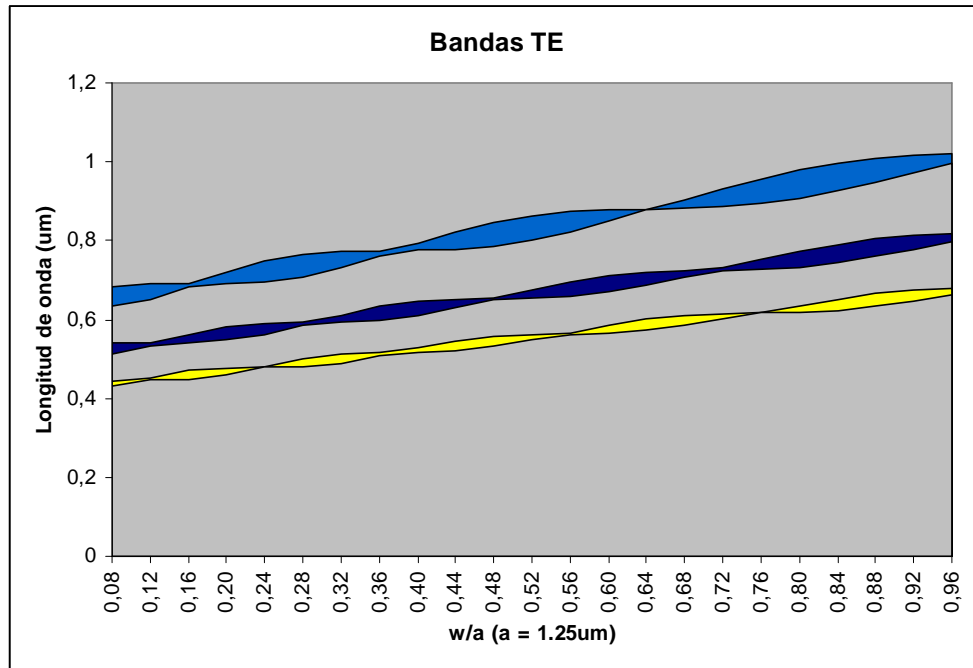
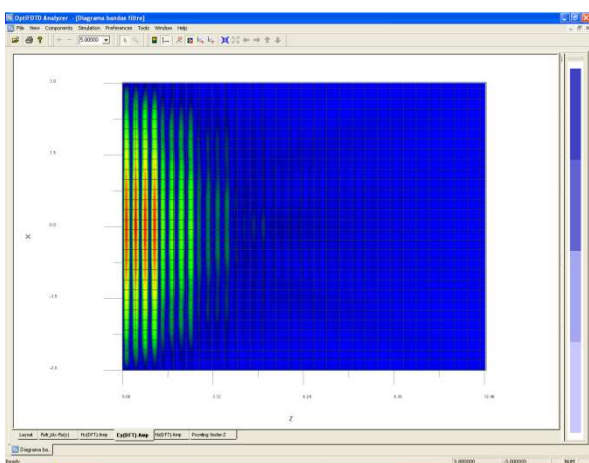


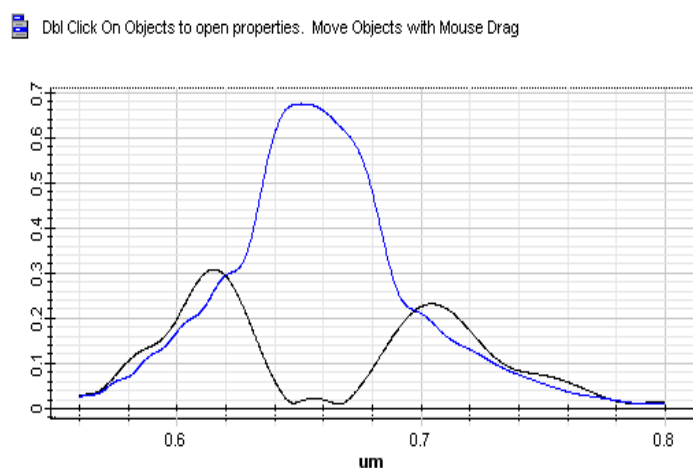
Figura 3. 6 Gaps de la región del espectro visible de la luz

Se comprueban los resultados obtenidos en las **figuras 3.5 y 3.6** con una simulación en dos dimensiones.

La simulación se realiza para comprobar que existe el gap en la banda 4 (banda azul). Se observa que lo calculado anteriormente concuerda con la simulación en 2D ( $w/a = 0.08$ ,  $\lambda = 660\text{nm}$ ). La simulación muestra un gap en una longitud de onda de  $655\text{nm}$  aproximadamente, **figura 3.7-b**, con una anchura de gap de más de  $30\text{nm}$ . La potencia recibida al final del dispositivo con respecto a la emitida es muy pequeña,  $30\text{dB}$  menos, en una estructura de una longitud de  $11.5\mu\text{m}$ .



a) La onda electromagnética se refleja en el cristal fotónico



b) Espectro de la simulación

Figura 3. 7 Simulación para comprobar si existe un gap en la banda 3 tal y como mostraban los diagramas de bandas

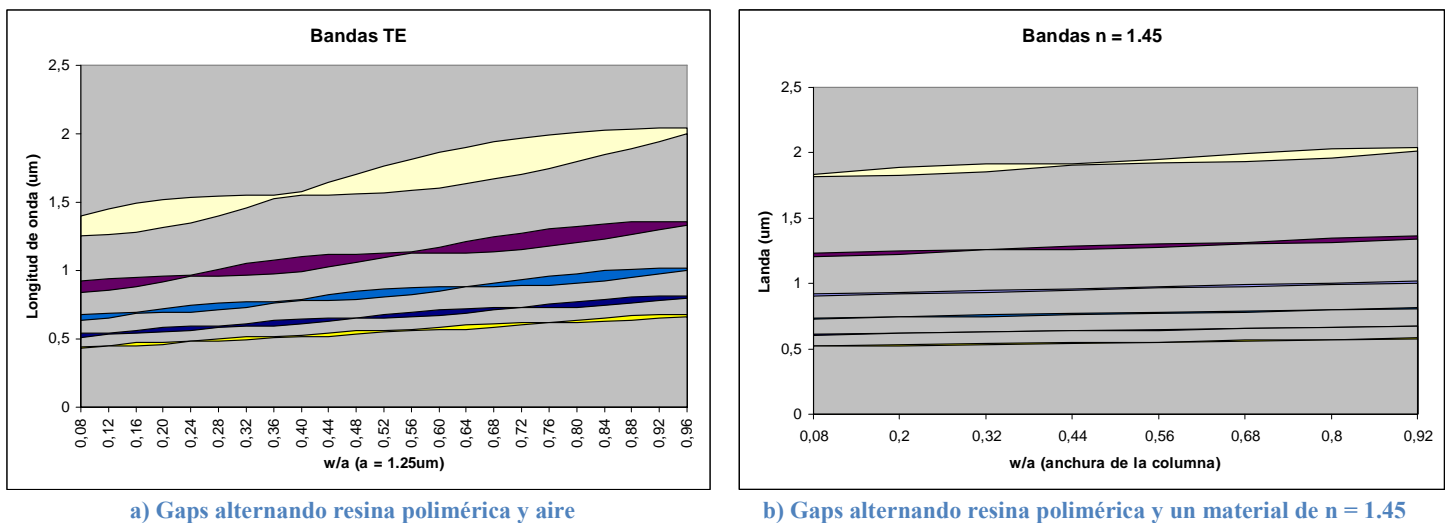
Después de las simulaciones realizadas con aire en el espacio entre las columnas se procede a realizar el cálculo de los diagramas de bandas al introducirle un material de índice de



refracción de  $n = 1.45$  entre las columnas para comprobar que sucede con los gaps calculados anteriormente.

- **Comparación de los diagramas de bandas**

En la **figura 3.8** se comparan los resultados para el cálculo de los gaps para el caso en el que se alternan resina polimérica y aire (**figura 3.8-a**) y en el caso en el que se alternan resina polimérica y un material de  $n = 1.45$  (**figura 3.8-b**). A primera vista se observa que la anchura de las bandas en la **figura 3.8-a** es mucho mayor que en la **figura 3.8-b**, algo que era previsible, puesto que al tener menor contraste entre los índices de refracción se guiarán más modos. La diferencia de anchura de los gaps puede observarse gráficamente en la **figura 3.8**.



**Figura 3. 8 Comparación de los diagramas de bandas para la polarización TE**

La primera diferencia notable la encontramos en la variación de la longitud de onda en ambos casos. Se observa como para un ancho de columna pequeño y para uno mayor, en el caso en el que se tiene el material de  $n = 1.45$  entre las columnas de resina, la variación de la longitud de onda de las bandas es muy pequeña, hay poca excursión en longitud de onda, mientras que para el caso del aire ésta es mucho mayor.

Así por ejemplo, tenemos que para el caso del aire hay una banda (Banda 3, color granate) centrada en aproximadamente 887nm para  $w/a = 0.08$ , y que para cuando ésta aumenta hasta 0.96 la banda se mueve hasta una longitud de onda de 1.34μm. En el caso en el que se tiene el material de  $n = 1.45$ , en cambio, la misma banda varía de 1.21μm hasta 1.34μm. Esa corta excursión de la banda es debida a que el contraste entre el índice de refracción de la resina y del material de  $n = 1.45$  es mucho más pequeño que en el caso del aire.

La segunda diferencia notable reside en la anchura de las bandas creadas. La diferencia entre las anchuras de las bandas que se crean en uno y otro caso es muy grande, normalmente las bandas creadas en aire son cuatro veces mayores que en el otro caso. La causa para esta diferencia también reside en el contraste del índice de refracción, puesto que al haber menos contraste la red de difracción guiará más modos, por lo que las bandas creadas serán menores. Esto que se acaba de comentar puede verse gráficamente en la **figura 3.10**, en la que se comparan la anchura del gap llamado Banda 6 en ambos casos.

Para mostrar más claramente los gaps cercanos al espectro de la luz visible se quita el gap superior (**figura 3.9**), con el objetivo de ver más claramente el poco recorrido que tienen en

### Capítulo 3. Red de Difracción en Transmisión

este caso el comienzo y el final de las bandas. Comparado con el caso de en el que se alternan la resina polimérica y el aire, el recorrido de los gaps es muy pequeño.

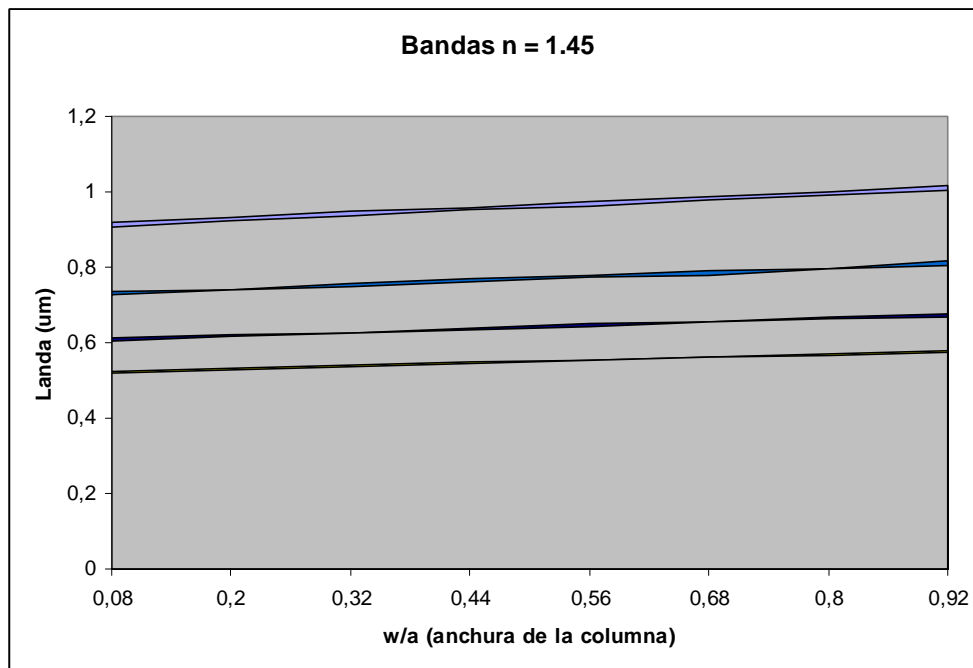


Figura 3. 9 Gaps cercanos a longitudes de onda del espectro visible cuando el material entre las columnas de la red de difracción es de un índice de refracción de  $n = 1.45$

### Capítulo 3. Red de Difracción en Transmisión

En las **tablas 3.1** y **3.2** se comprueban las diferencias en la anchura de algunos gaps y la evolución en longitud de onda de los mismos. Las bandas aparecen enumeradas como las obtiene el OptiFDTD, puesto que las enumera de este modo.

<i>Aire</i>	<i>Banda 4</i>			<i>Banda 5</i>			<i>Banda 6</i>		
w/a	$\lambda_{sup}$ ( $\mu m$ )	$\lambda_{inf}$ ( $\mu m$ )	Anchura ( $\mu m$ )	$\lambda_{sup}$ ( $\mu m$ )	$\lambda_{inf}$ ( $\mu m$ )	Anchura ( $\mu m$ )	$\lambda_{sup}$ ( $\mu m$ )	$\lambda_{inf}$ ( $\mu m$ )	Anchura ( $\mu m$ )
0,08	0,68217	0,63332	0,04886	0,53934	0,51174	0,02760	0,44465	0,42952	0,01513
0,2	0,71860	0,69302	0,02558	0,58116	0,54755	0,03361	0,47755	0,46091	0,01665
0,32	0,77296	0,73151	0,04145	0,61180	0,59243	0,01937	0,51352	0,48963	0,02388
0,44	0,82122	0,77861	0,04261	0,65098	0,62962	0,02136	0,54566	0,52106	0,02460
0,56	0,87517	0,82321	0,05196	0,69661	0,65861	0,03800	0,56628	0,56283	0,00345
0,68	0,90404	0,88282	0,02123	0,72502	0,70878	0,01623	0,61097	0,58433	0,02664
0,8	0,97841	0,90789	0,07051	0,77264	0,73292	0,03972	0,63648	0,61773	0,01875
0,92	1,01725	0,97186	0,04540	0,81257	0,77755	0,03501	0,67553	0,64847	0,02706

Tabla 3. 1 Evolución de los gaps alternándose resina y aire

<i>n = 1.45</i>	<i>Banda 4</i>			<i>Banda 5</i>			<i>Banda 6</i>		
w/a	$\lambda_{sup}$ ( $\mu m$ )	$\lambda_{inf}$ ( $\mu m$ )	Anchura ( $\mu m$ )	$\lambda_{sup}$ ( $\mu m$ )	$\lambda_{inf}$ ( $\mu m$ )	Anchura ( $\mu m$ )	$\lambda_{sup}$ ( $\mu m$ )	$\lambda_{inf}$ ( $\mu m$ )	Anchura ( $\mu m$ )
0,08	0,92017	0,90786	0,01231	0,73646	0,72586	0,01060	0,61289	0,60557	0,00733
0,2	0,93125	0,92376	0,00748	-	-	0,00000	0,62080	0,61623	0,00457
0,32	0,94869	0,93462	0,01407	0,75840	0,74802	0,01038	-	-	0,00000
0,44	0,95913	0,95170	0,00743	0,76902	0,75975	0,00928	0,63964	0,63426	0,00539
0,56	0,97579	0,96260	0,01319	0,77772	0,77306	0,00466	0,65003	0,64226	0,00778
0,68	0,98857	0,97788	0,01069	0,79273	0,78027	0,01246	0,65680	0,65390	0,00289
0,8	1,00183	0,99180	0,01003	-	-	0,00000	0,66639	0,66307	0,00331
0,92	1,01875	1,00350	0,01526	0,81500	0,80266	0,01233	0,67801	0,66984	0,00817

Tabla 3. 2 Evolución de los gaps alternándose resina y un material de n = 1.45

En las **tablas 3.1** y **3.2** se aprecia la misma tendencia en cuanto a los límites del gap, puesto que a menor w/a, la diferencia en la localización de los gaps es mucho mayor que cuando tienes un w/a cercano a uno. Para un w/a próximo a uno, la diferencia entre el material de n = 1.45 y el aire es muy pequeña en lo que respecta a la localización del gap, aunque la diferencia entre las anchuras sea notable (cuatro veces menor con el material de n = 1.45). Esto se debe a que a pesar de tener dos materiales con una diferencia de índice de refracción grande, el espacio entre las columnas es muy pequeño, por lo que la influencia del material entre las columnas es menor que cuando la relación w/a es más baja. Es por esto que la localización de los gaps no es tan diferente en ambos casos para un w/a alto, sí es diferente en cambio el tamaño de esos gaps, tal y como puede verse en la **figura 3.10**.

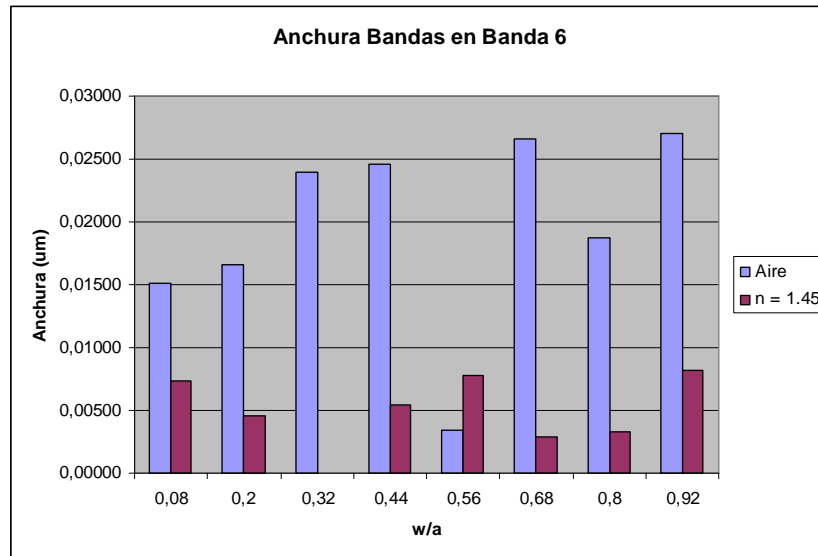


Figura 3. 10 Comparación de la anchura de los gaps para la banda 6

En la **figura 3.11** se muestra la variación de los gaps con respecto al aumento del índice de refracción en el espacio entre las columnas, para un ancho de columna de 250nm con una constante de red  $a = 1.25\mu\text{m}$  ( $w/a = 0.20$ ).

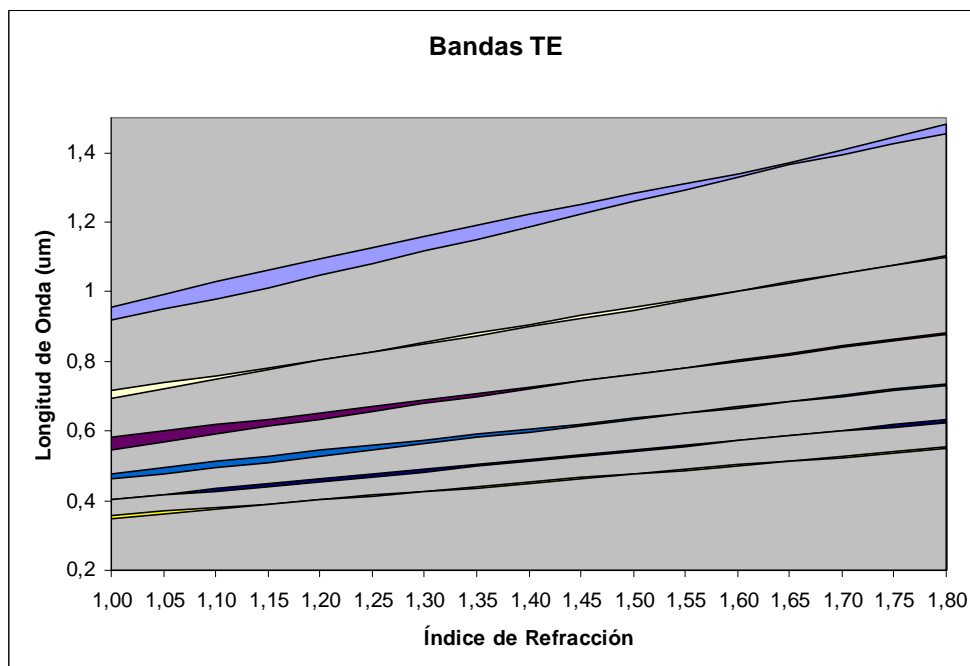


Figura 3. 11 Evolución de los gaps de la red de difracción al variar el índice de refracción del material entre las columnas

Tal y como se esperaba, las bandas muestran una anchura mucho mayor para un índice de refracción pequeño (en torno a  $n = 1$ ) que para un índice de refracción mayor, más próximo al índice de refracción de la resina ( $n = 1.63$ ). Si se llegasen a ver índices de refracción mayores a los mostrados en la **figura 3.11**, volvería a apreciarse como los gaps se van haciendo cada vez más anchos.

### Capítulo 3. Red de Difracción en Transmisión

Se muestran a continuación, en la **figura 3.12**, los gaps cercanos al espectro visible para observarlos mejor. En este caso se observa claramente lo mencionado anteriormente, con unos gaps más anchos para índices de refracción pequeños, en torno a  $n = 1$ , que para índices de refracción mayores. Se puede observar como los gaps muestran unas anchuras mínimas para un índice de refracción en torno a  $n = 1.55-1.65$ .

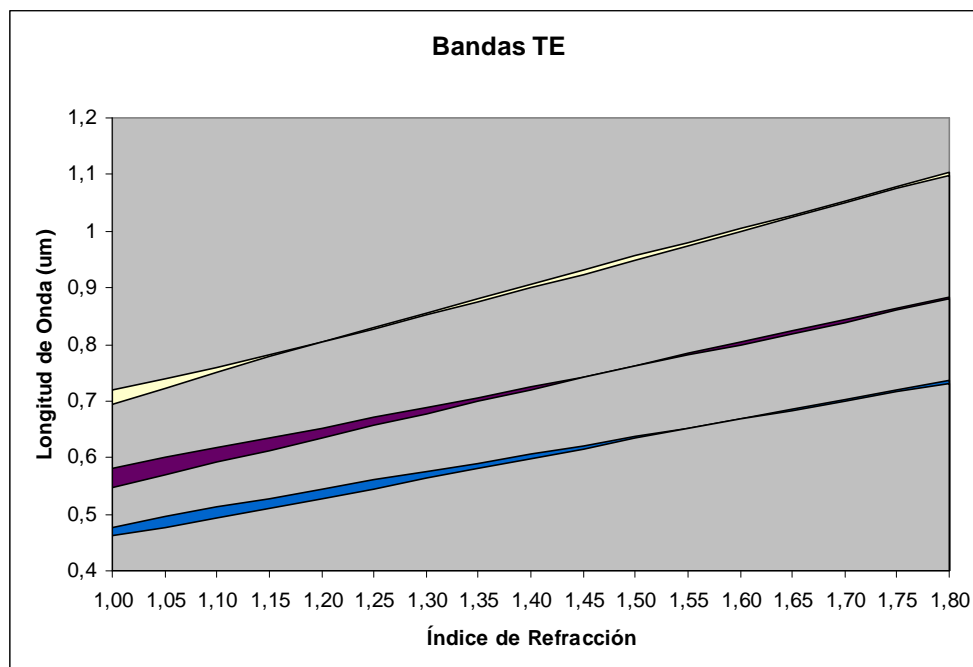


Figura 3. 12 Evolución de los gaps de la red de difracción al variar el índice de refracción del material entre las columnas para tres de los gaps calculados

### 3.3 Simulaciones en 3D

Tras el estudio de los gaps en función de la relación  $w/a$  y en función del índice de refracción, se procede a realizar las simulaciones en tres dimensiones en transmisión. En este caso se tiene una altura de las columnas de resina polimérica de 700nm, sobre tres capas de resina de 0nm (las columnas de resina están sobre el vidrio directamente), 500nm (**figura 3.13**) y 1000nm de grosor. Estas capas están a su vez sobre un soporte de vidrio de  $n = 1.55$ .

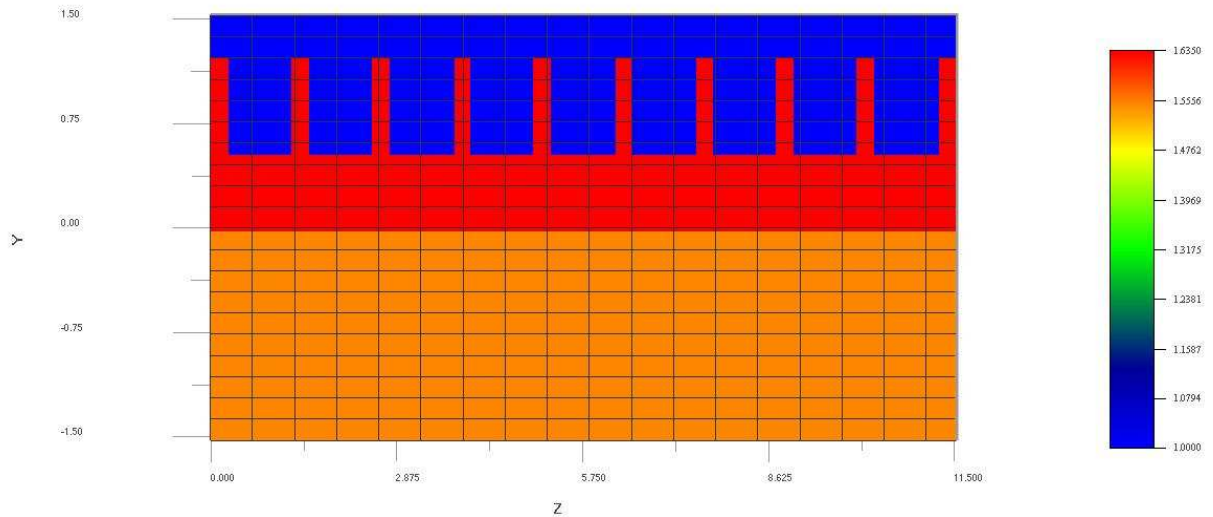


Figura 3.13 Vista lateral de la red de difracción con una base de 500nm de resina

Las características del pulso de luz se muestran en la **figura 3.14**. Las simulaciones han sido realizadas con los mismos parámetros de la onda electromagnética,  $\lambda = 650\text{nm}$  y una anchura del pulso temporal de  $t = 1 \cdot 10^{-14}\text{s}$ .

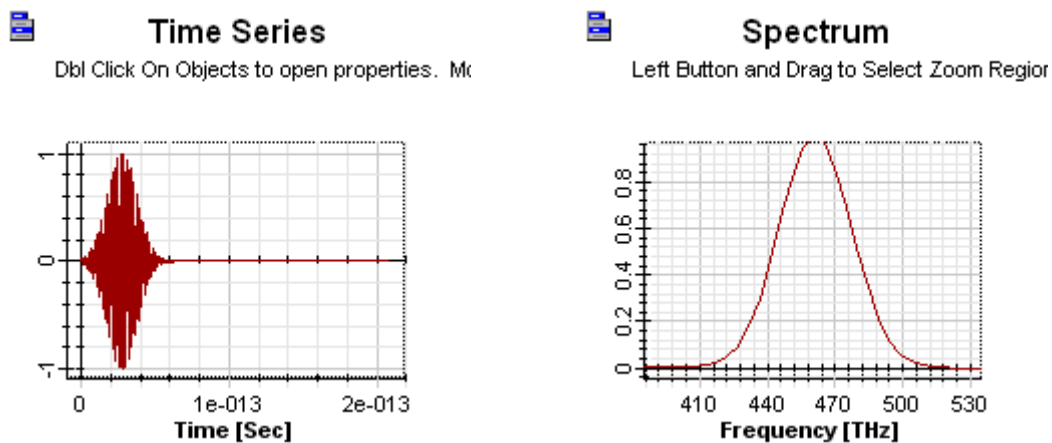
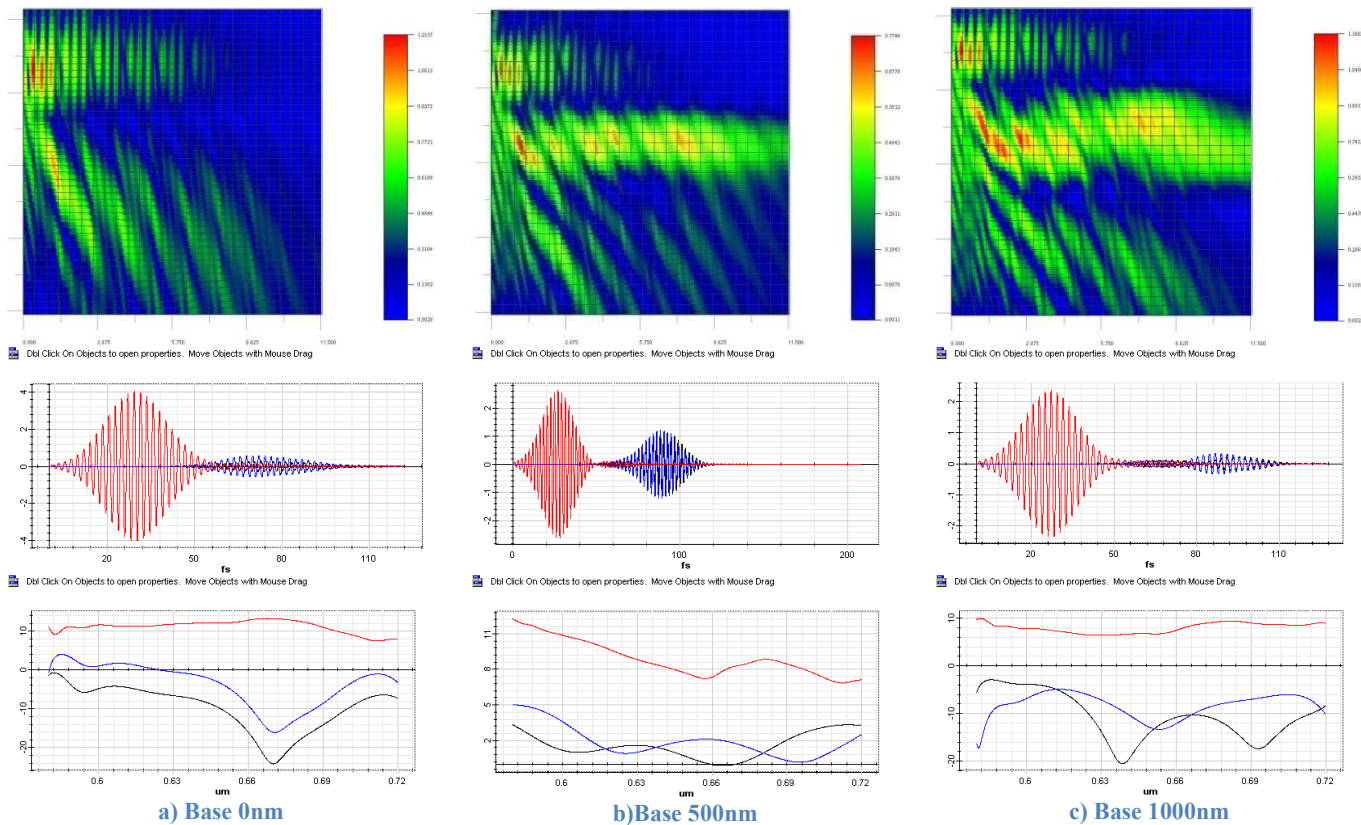


Figura 3.14 Pulso gaussiano utilizado en las simulaciones en el dominio temporal y espectral

En la **figura 3.14** se muestran los tres tipos de estructuras sobre las que se realizará el estudio, la **figura 3.14-a** en la que no tiene base, la **b** en la que tiene una base de 500nm de grosor, y la **c**, que tiene 1000nm de grosor. Las simulaciones muestran la transmisión a lo largo del eje  $z$  a mitad de la estructura, plano  $YZ$ , los resultados en el dominio temporal (para la **figura 3.15**) y el espectro resultante. En principio, según la simulación en 2D con aire entre las columnas, debería haber un gap a aproximadamente 660nm de longitud de onda, por lo que debería notarse en los resultados espectrales.



**Figura 3. 15 Transmisión, resultados en el dominio temporal y espectral para las tres estructuras sin ningún material entre las columnas**

En la **figura 3.15** se observa cómo según el tipo de estructura que sea, la luz se guía o se pierde por el vidrio. Para los casos de las **figuras 3.15-a y b** se observa como la luz se guía por la base de resina, puesto que actúa como guía, mientras que por el espacio de las columnas (parte superior de la imagen) la potencia no llega al final, y a la parte del vidrio se acopla parte de la energía que finalmente se pierde. En el caso de la **figura 3.15-a**, al no tener base de resina, no se aprecia guiado de ningún tipo, sí que se observa que se acopla bastante potencia al vidrio, y que parte pasa por las columnas, pero en menor cantidad.

En la **figura 3.15**, y en las siguientes de este apartado, los colores de las líneas mostradas en los espectros siguen el mismo patrón. La **línea de color rojo**, muestra el espectro de los datos recogidos en un punto cercano a la fuente de luz. En el caso de la base de 0nm, el punto de observación está situado a 350nm de altura en el eje y, es decir, a mitad de altura de columna, mientras que el punto de observación que recoge los datos para la **línea negra** está situado también a 350nm de altura, pero al final de la estructura, en  $z = 10.75\mu m$ , entre las dos últimas columnas. El último punto, correspondiente a la **línea azul**, muestra los datos recopilados a la misma altura que los anteriores, pero en una posición de  $z = 11.5\mu m$ , es decir, al final del dispositivo. Las posiciones para los casos en los que la estructura tiene una base de resina son equivalentes en  $z$ , pero la posición respecto a la altura varía, situándose estos en 250nm para el caso de la base de 500nm, y 500nm para el caso de la base de 1000nm, es decir, se a mitad de la altura de la base. En el eje x todos los puntos se sitúan en  $x = 0$ , es decir, en el centro de la estructura.



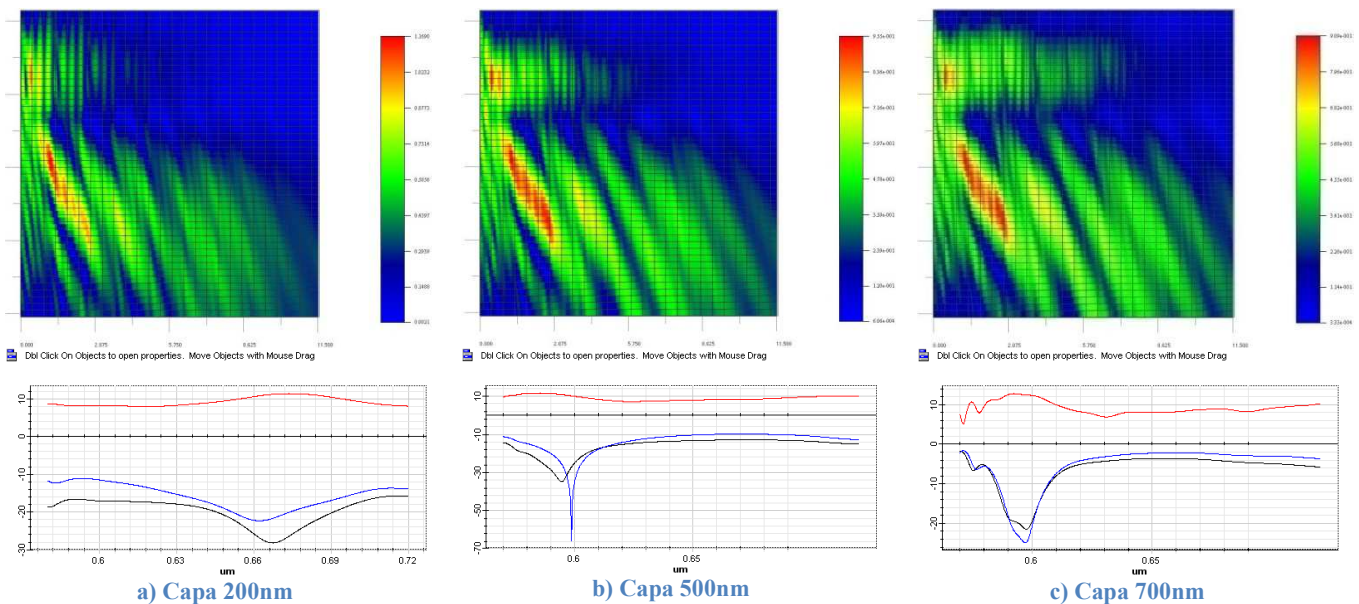
En la **figura 3.15** en las gráficas del espectro se observa cómo se obtienen resultados mayores que 0dB, esto ya ha ocurrido anteriormente (**Capítulo 2. Simulación de Sensores de Artículos**), y es debido a que al ser un punto de observación puntual, a él se acopla la potencia que va de frente, y parte de la de su alrededor, dando como resultado esa falsa ganancia que muestra. Se puede aplicar un factor de corrección respecto a la ganancia resultante, pero la localización de los gaps, si aparecen, es en principio correcta. De hecho, en **figura 3.15-a**, la correspondiente al espectro se muestra como en las líneas azul y negra (correspondientes a  $z = 10.75\mu\text{m}$  y  $z = 11.5\mu\text{m}$ ) se filtra una banda alrededor de 670nm, cercana a la calculada en 2D.

El espectro de la **figura 3.15-b** no muestra gap de ningún tipo, de hecho se observa como la potencia recogida por todos los puntos de observación de la estructura dan resultados por encima de 0dB, y aunque eso no sea lo más importante, no se aprecian pérdidas apreciables con respecto a la media del espectro, indicando que no se ha conseguido observar ningún gap en los resultados. Las gráficas en el dominio temporal no ofrecen ningún resultado que se vaya a comentar en el futuro, por lo que en las simulaciones realizadas a continuación se ha preferido no incluirlas. A continuación se muestran los resultados obtenidos para las distintas simulaciones realizadas, según la base de resina de cada estructura.

### 3.3.1 Simulaciones de la Red de Difracción Base 0nm

Los resultados de la propagación de la onda con la inclusión de materiales de distinto índice de refracción varían notablemente en la red de difracción de base 0nm. Las simulaciones realizadas muestran la propagación a lo largo del eje  $z$ , plano  $YZ$ , a mitad de la estructura, y el espectro resultante. Se han realizado simulaciones con tres materiales distintos,  $n = 1.15$ ,  $n = 1.45$  y  $n = 1.74$ . Para cada material se han realizado a su vez otras tres simulaciones diferentes para distintos grosores de la capa de material.

- **Material de  $n = 1.15$**



**Figura 3. 16 Resultados de red de difracción base 0nm con distintas capas de material de  $n = 1.15$**

La **figura 3.16** muestra los resultados de la simulación para el material de  $n = 1.15$ . Se comprueba como para este caso gran parte de la potencia atraviesa el vidrio puesto que al tener



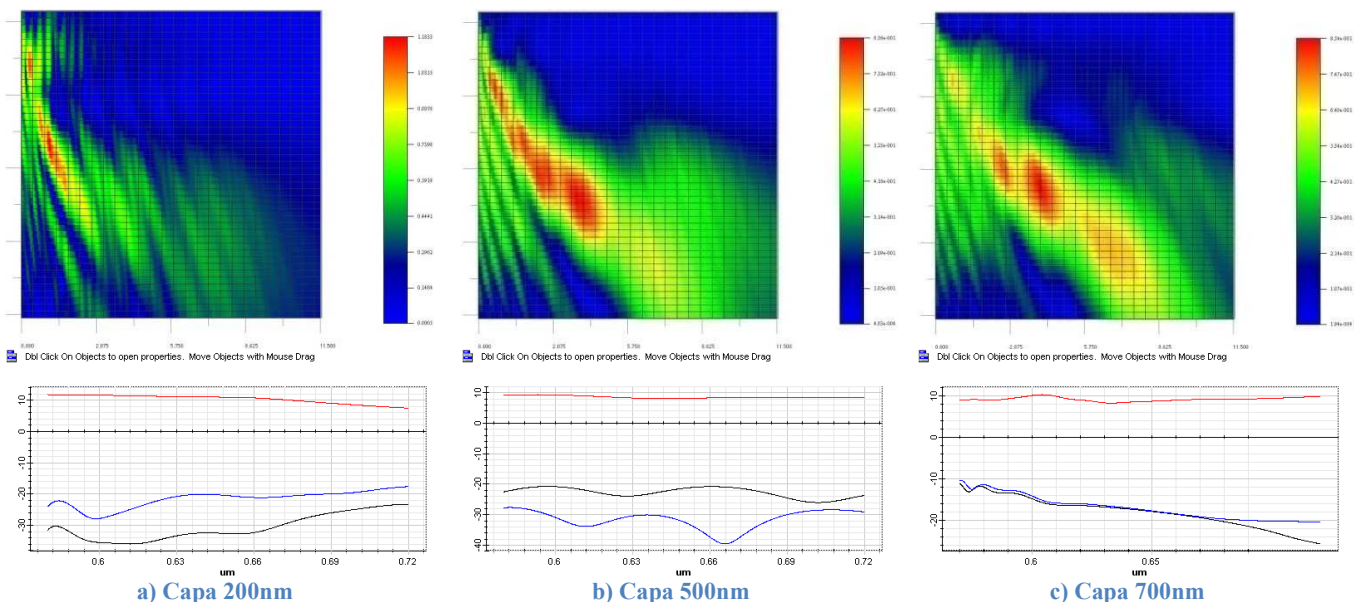
mayor índice de refracción, la luz tenderá a atravesar ese material. De los espectros calculados de los puntos de observación, situados a una altura de mitad de columna de la red de difracción, se observan grandes diferencias dependiendo del grosor de las capas de material.

Aunque se observa que en el punto de observación cercano a la fuente de luz (color rojo) está por encima de los 0dB, ese resultado es incorrecto, y debería aplicarse un factor de corrección a la baja. Las otras dos líneas (azul y negra), los resultados de los datos recogidos al final de la estructura, muestran unas características distintas en cada caso. Cuando el grosor de la capa de material es de 200nm, **figura 3.16-a**, se observa como existe una región en donde las pérdidas son más acusadas que en el resto. Esta región se sitúa aproximadamente donde existía el gap para el caso del aire, por lo que cuando la capa no es gruesa aun se mantienen ciertas evidencias de ese gap.

Para el caso en el que la capa de material de  $n = 1.15$  tiene un grosor de 500nm (**figura 3.16-b**) los resultados cambian radicalmente. Los resultados para los datos del final de la estructura muestran un pico de pérdidas bastante estrecho, pero situado aproximadamente en algo menos de 600nm, mientras que ya no muestra ningún tipo de gap en la región de los 660nm.

En el último caso en el que la capa de material tiene un grosor de 700nm (**figura 3.16-c**), es decir, la altura de las columnas, se sigue viendo un gap cercano a los 600nm (centrado en 590nm aproximadamente), pero en este caso la anchura del mismo es mucho mayor que en el caso anterior. Se puede decir que las diferencias en todos los casos son notables para un mismo material, siendo únicamente el grosor de las capas de este material las que varían.

- **Material de  $n = 1.45$**

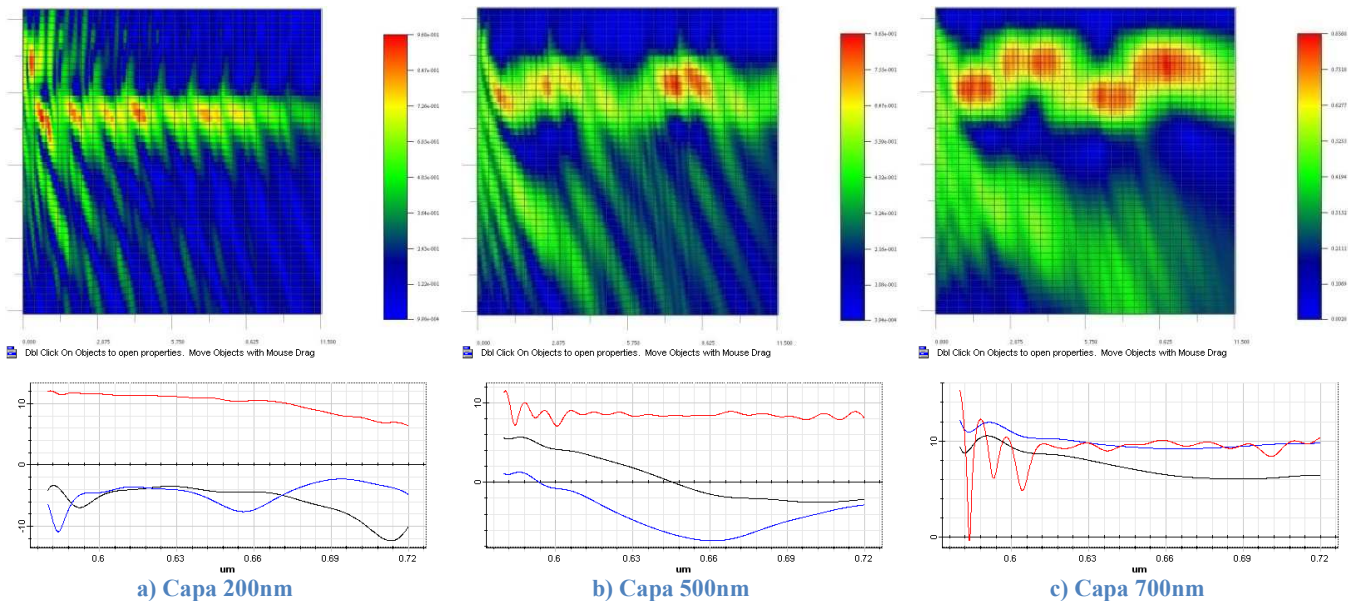


**Figura 3. 17 Resultados de red de difracción base 0nm con distintas capas de material de  $n = 1.45$**

La **figura 3.17** muestra los resultados de la simulación para el material de  $n = 1.45$ . Se comprueba como para este caso gran parte de la potencia sigue atravesando el vidrio. De los espectros calculados de los puntos de observación, no se pueden sacar grandes conclusiones. En ningún caso se puede decir que exista un gap, las variaciones visibles en el espectro no se muestran de forma abrupta indicando un gap, si no que son suaves variaciones poco profundas.

Si que se observan diferencias en la potencia que llega al final en los tres casos. El caso en el que la capa de material de  $n = 1.45$  tiene un grosor de 700nm (**figura 3.17-c**), la altura de las columnas de la red de difracción, la transmisión de potencia con respecto de la fuente de luz cae aproximadamente 15dB (en media para todo el espectro mostrado), mientras que para el caso en el que el grosor de la capa es de 200nm (**figura 3.17-a**) las pérdidas llegan a 25dB.

- **Material de  $n = 1.74$**



**Figura 3. 18 Resultados de red de difracción base 0nm con distintas capas de material de  $n = 1.74$**

La **figura 3.18** muestra los resultados de la simulación para el material de  $n = 1.74$ . Se comprueba como para este caso gran parte de la potencia se guía por la red de difracción, puesto que ahora el material incluido tiene un índice de refracción mayor que el del vidrio. El índice de refracción efectivo de las columnas y el material va a ser mayor que el del vidrio para los tres casos.

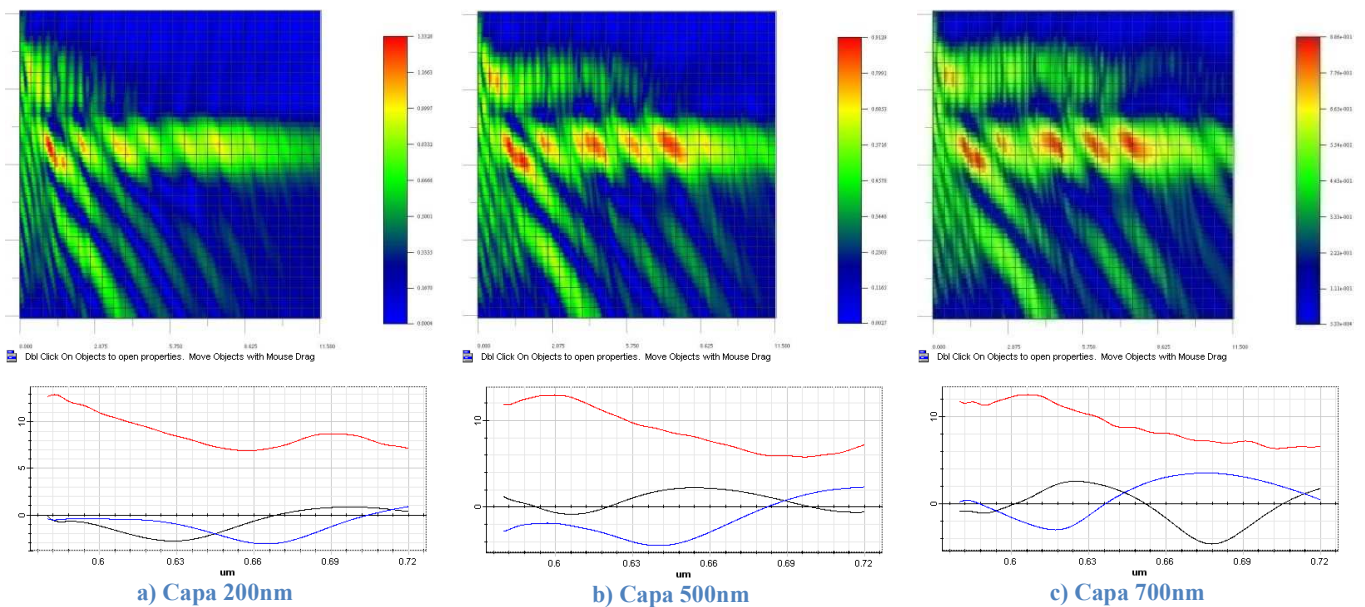
De los espectros calculados de los puntos de observación, no se pueden sacar grandes conclusiones. En ningún caso se puede decir que exista un gap, las variaciones visibles en el espectro no se muestran de forma abrupta indicando un gap.

Si que se observan diferencias en la potencia que llega al final en los tres casos. La potencia recibida en los puntos de observación aumenta conforme aumenta el grosor de las capas de material, incluso se llega a tener resultados mayores de 0dB en los casos de las **figuras 3.18-b** y **c**, algo que aunque necesita una corrección mediante un factor de corrección, si que indica la cantidad de luz que se ha guiado a través del material y las columna.

### 3.3.2 Simulaciones de la Red de Difracción Base de 500nm

Los resultados de la propagación de la onda con la inclusión de materiales de distinto índice de refracción no muestran grandes variaciones para el caso de la red de difracción que tiene una base de resina de 500nm de grosor. Las simulaciones realizadas muestran la propagación a lo largo del eje z, plano YZ, a mitad de la estructura, y el espectro resultante. Se han realizado simulaciones con tres materiales distintos,  $n = 1.15$ ,  $n = 1.45$  y  $n = 1.74$ . Para cada material se han realizado a su vez otras tres simulaciones diferentes para distintos grosores de la capa de material. Los puntos de observación utilizados en este caso se sitúan a una altura de 250nm, es decir, se recogen los datos en mitad de la base de 500nm que actuara como guía de onda.

- **Material de  $n = 1.15$**



**Figura 3. 19 Resultados de red de difracción base 500nm con distintas capas de material de  $n = 1.15$**

La **figura 3.19** muestra los resultados de la simulación para el material de  $n = 1.15$ , para la red de difracción con una base de resina de 500nm. Se comprueba como para este caso gran parte de la potencia se guía por la base de 500nm de grosor de la red de difracción, puesto que ahora la base actuara como guía de onda al tener la resina un índice de refracción mayor que el vidrio, por lo que la luz se confina en esa región por reflexión total interna.

De los espectros calculados de los puntos de observación, no se pueden sacar grandes conclusiones. En ningún caso se puede decir que exista un gap, pero sí que se observa cómo se propaga mucha más luz por la base que por la zona de las columnas de resina.

Realmente ni siquiera se observa gran diferencia en la potencia transmitida en cada simulación, puesto que los resultados en las tres simulaciones muestran que los puntos de observación muestran una potencia recibida de aproximadamente 0dB, que aunque no sea real, puede servir como marco de referencia en este caso.

- Material de  $n = 1.45$

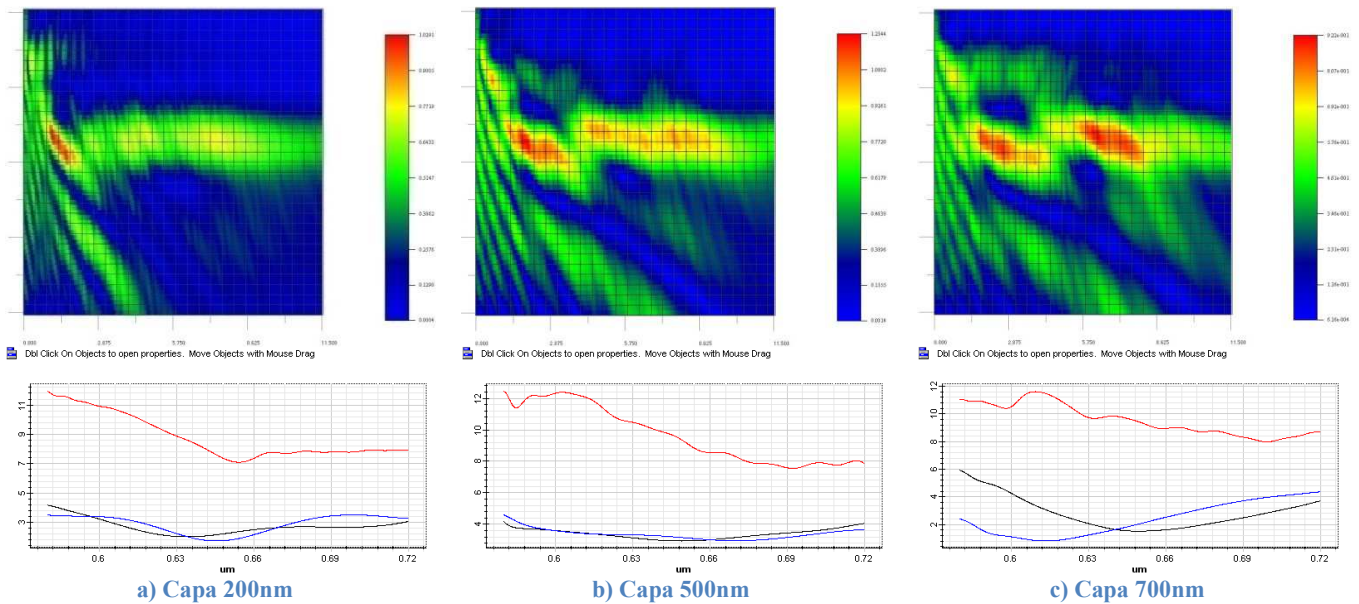


Figura 3. 20 Resultados de red de difracción base 500nm con distintas capas de material de  $n = 1.45$

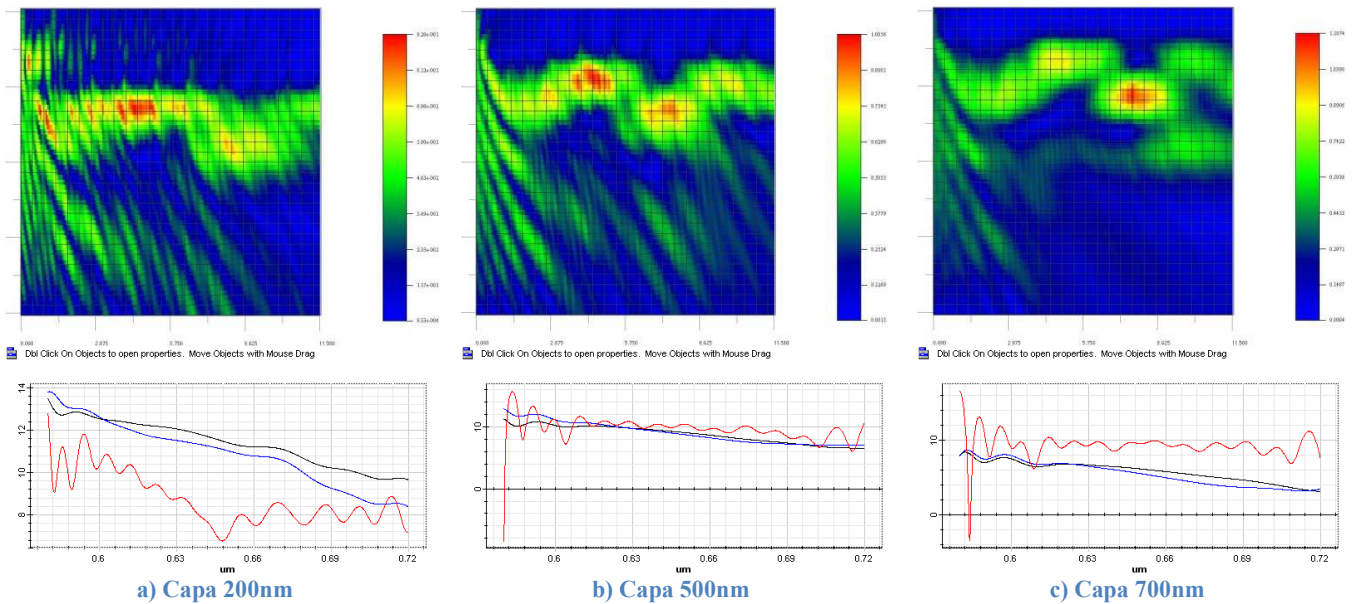
La **figura 3.20** muestra los resultados de la simulación para el material de  $n = 1.45$ , para la red de difracción con una base de resina de 500nm. En la figura puede observarse la potencia que se transmite en cada caso, y visualmente sí que se aprecian grandes cambios en cada caso, en el caso de la capa de 200nm de material de  $n = 1.45$  (**figura 3.20-a**) se ve que la potencia transmitida se propaga básicamente a través de la base de resina, mientras que en el caso de la capa de 700nm (**figura 3.20-c**) se observa como la potencia se propaga por una región mayor que la base de resina, acoplándose parte de la potencia a la región de las columnas de resina.

De los espectros calculados de los puntos de observación, no se pueden sacar grandes conclusiones. En ningún caso se puede decir que exista un gap, los espectros quedan todos por encima de los 0dB, por lo que se puede decir que no son concluyentes.

Realmente no se observa gran diferencia en la potencia transmitida en cada simulación, puesto que los resultados en las tres simulaciones muestran que los puntos de observación muestran una potencia recibida mayor que 0dB, por lo que no se puede sacar ninguna referencia en la que basarse para sacar conclusiones válidas. La recogida de datos con los puntos de observación puede dar lugar a resultados no reales que deban corregirse aplicando un factor de corrección, pero aunque se aplicase un factor de corrección, los espectros resultantes no muestran rasgos especiales. Se puede decir que para el material de  $n = 1.45$  las simulaciones no muestran ningún gap.



- **Material de  $n = 1.74$**



**Figura 3. 21 Resultados de red de difracción base 500nm con distintas capas de material de  $n = 1.74$**

La **figura 3.21** muestra los resultados de la simulación para el material de  $n = 1.74$ , para la red de difracción con una base de resina de 500nm. En la figura puede observarse la potencia que se transmite en cada caso, y visualmente sí que se aprecian diferencias para cada caso. En el caso de la capa de 200nm de material de  $n = 1.74$  (**figura 3.21-a**) se ve que la potencia transmitida se confina básicamente en la capa de material y se transmite a través de las columnas, aunque acoplándose bastante potencia también a la base de resina, mientras que en el caso de la capa de 700nm (**figura 3.21-c**) se observa como la potencia se propaga casi únicamente atravesando las columnas de resina, siendo la potencia que se transmite a través de la base mínima.

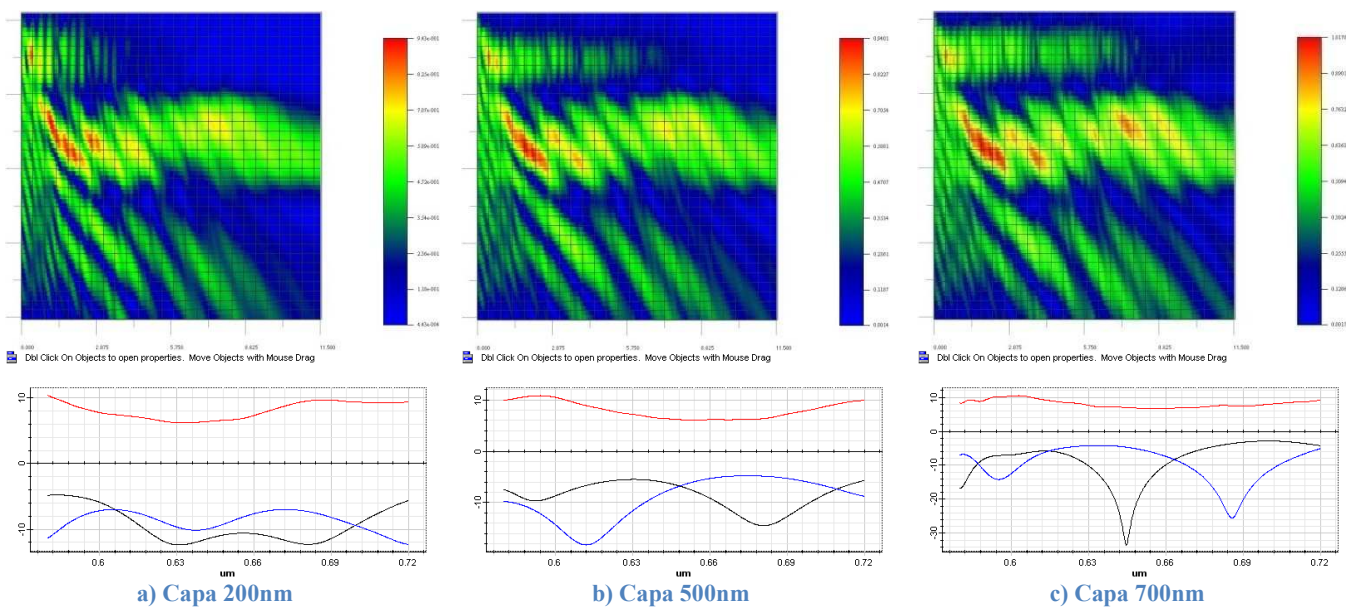
De los espectros calculados de los puntos de observación, no se pueden sacar grandes conclusiones. En ningún caso se puede decir que exista un gap, los espectros quedan todos por encima de los 0dB, por lo que se puede decir que no son concluyentes.

Los resultados espectrales de las simulaciones realizadas para la red de difracción no han mostrado resultados característicos para ningún material ni grosor de la capa del mismo. La influencia de la base actuando como guía minimiza el efecto de filtrado de la red de difracción, y la transmisión es muy grande, lo contrario que pasaba para el caso en el que la base tiene 0nm. En este caso la red de difracción no sería capaz de caracterizar el índice de refracción mediante el resultado espectral, pero sí sería capaz de caracterizarlo en función de la potencia transmitida, puesto que se observa que al aumentar el índice de refracción del material insertado entre las columnas aumenta la potencia transmitida. La caracterización del índice de refracción mediante la potencia transmitida sería viable tanto en el caso de la base de 0nm y de 500nm de resina. A continuación se comprueban los resultados para la estructura de base de 1000nm.

## 3.3.3 Simulaciones de la Red de Difracción Base de 1.0μm

Los resultados de la propagación de la onda con la inclusión de materiales de distinto índice de refracción no muestran grandes variaciones para el caso de la red de difracción que tiene una base de resina de 1000nm de grosor. Las simulaciones realizadas muestran la propagación a lo largo del eje z, plano YZ, a mitad de la estructura, y el espectro resultante. Se han realizado simulaciones con tres materiales distintos,  $n = 1.15$ ,  $n = 1.45$  y  $n = 1.74$ . Para cada material se han realizado a su vez otras tres simulaciones diferentes para distintos grosores de la capa de material. Los puntos de observación utilizados en este caso se sitúan a una altura de 500nm, es decir, se recogen los datos en mitad de la base de 1000nm que actuara como guía de onda.

- **Material de  $n = 1.15$**



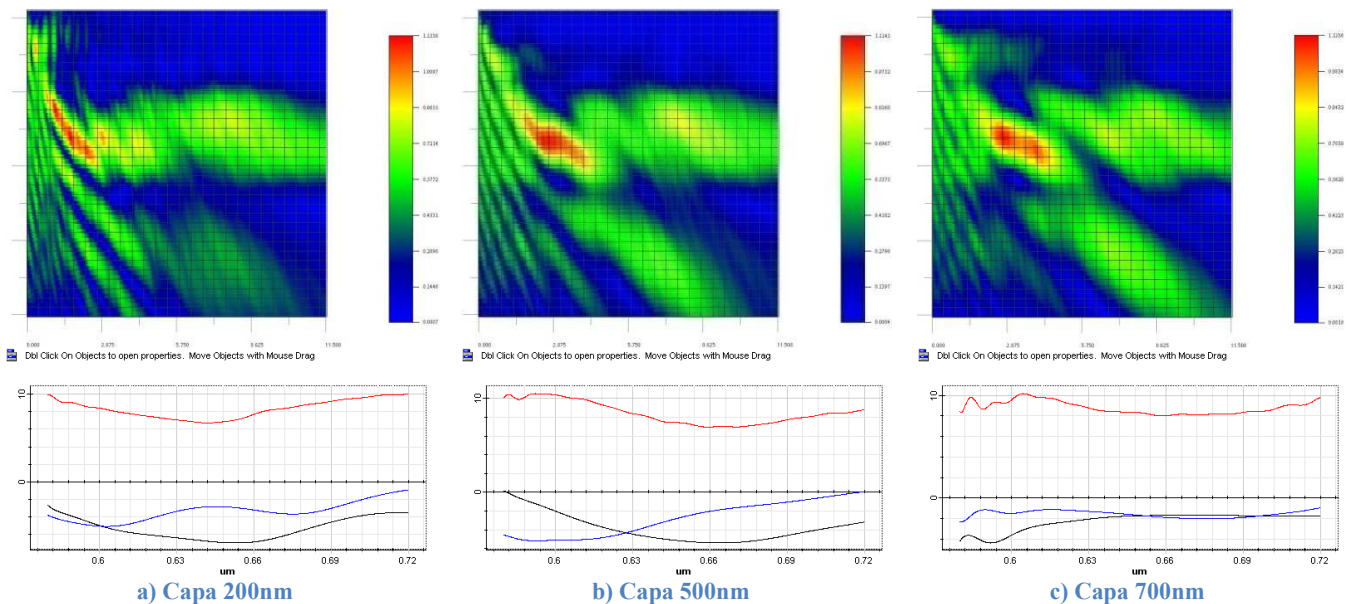
**Figura 3. 22 Resultados de red de difracción base 1000nm con distintas capas de material de  $n = 1.15$**

La **figura 3.22** muestra los resultados de la simulación para el material de  $n = 1.15$ , para la red de difracción con una base de resina de 1000nm. En este caso gran parte de la potencia se guía por la base de 1000nm de grosor, pero en menor medida que en el caso de la base de 500nm. La potencia recibida en el punto de observación es menor que en el caso anterior, y si que muestra regiones del espectro en la que las pérdidas son más acusadas que en el resto, pudiéndose decir que se comprueba la existencia de gaps en los resultados.

Las diferencias entre las simulaciones son grandes, en el caso de la capa de material de un grosor de 200nm (**figura 3.22-a**) el espectro no muestra ningún gap acusado. Para el caso de la capa de 500nm (**figura 3.22-b**) si que se observa como existen dos regiones en las que las pérdidas son mayores. En realidad los resultados varían según donde se encuentre situado el punto de observación, puesto que la línea azul (punto de observación situado en una posición del eje z entre las dos columnas,  $z = 10.75\mu\text{m}$ ) muestra su gap para aproximadamente 615nm, mientras que la línea negra (punto de observación situado en una posición del eje z a mitad de columna,  $z = 11.25\mu\text{m}$ ) muestra su gap para una longitud de onda de aproximadamente de 680nm.

El comportamiento del caso de la capa de 700nm (**figura 3.22-c**) también es diferente según donde se encuentren los puntos de observación, pero se observan dos gaps mas abruptos que en el caso anterior, pero esta vez la situación de los gaps es completamente diferente en ambos casos, para la línea azul se encuentra aproximadamente en 685nm, mientras que para la línea negra se encuentra aproximadamente en 655nm.

- **Material de  $n = 1.45$**



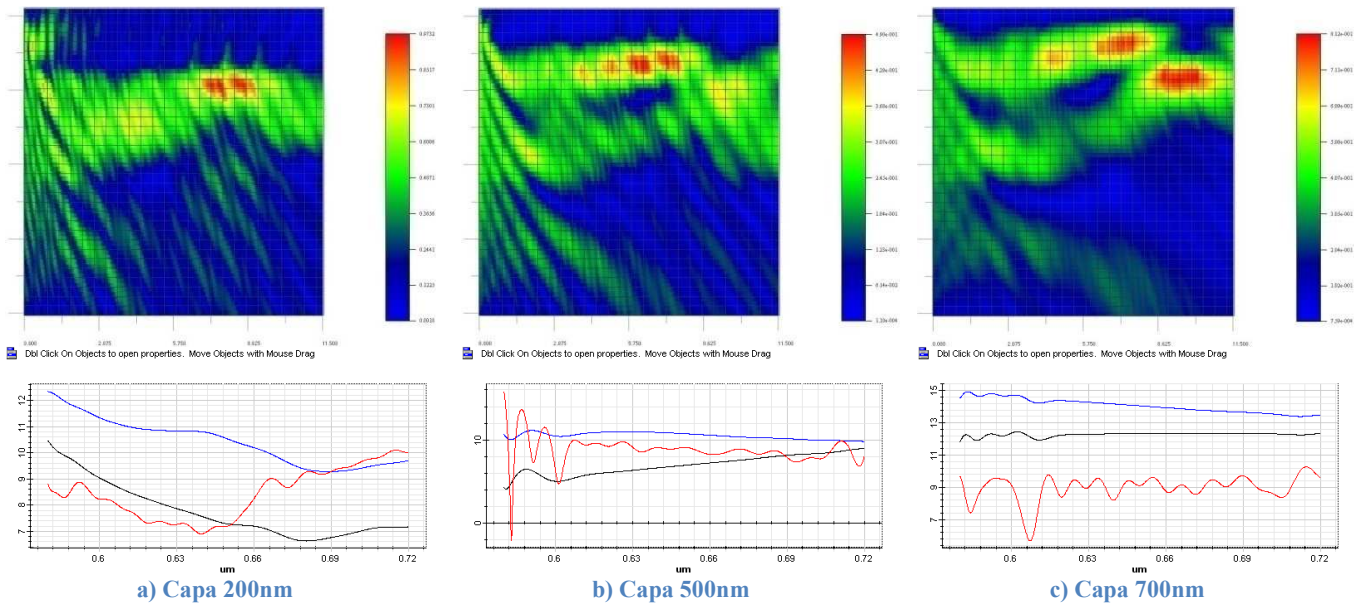
**Figura 3. 23 Resultados de red de difracción base 1000nm con distintas capas de material de  $n = 1.45$**

La **figura 3.23** muestra los resultados de la simulación para el material de  $n = 1.45$ , para la red de difracción con una base de resina de 1000nm. En la figura puede observarse la potencia que se transmite en cada caso, y visualmente no se aprecian grandes cambios en cada caso. No se aprecian que se acople mucha más potencia en el caso en el que la capa de material es de 700nm con respecto a los otros dos casos.

De los espectros calculados de los puntos de observación, no se pueden sacar grandes conclusiones. En ningún caso se puede decir que exista un gap, los espectros quedan todos por debajo de los 0dB, pero no hay cambios abruptos en la región espectral observada.

No se observa gran diferencia en la potencia transmitida en cada simulación, puesto que los resultados en las tres simulaciones muestran que los puntos de observación muestran una potencia recibida mayor que 0dB, por lo que no se puede sacar ninguna referencia en la que basarse para sacar conclusiones válidas. La recogida de datos con los puntos de observación puede dar lugar a resultados no reales que deban corregirse aplicando un factor de corrección, pero aunque se aplicase un factor de corrección, los espectros resultantes no muestran rasgos especiales. Se puede decir que para el material de  $n = 1.45$  las simulaciones no muestran ningún gap.

- **Material de  $n = 1.74$**



**Figura 3. 24 Resultados de red de difracción base 1000nm con distintas capas de material de  $n = 1.74$**

La **figura 3.24** muestra los resultados de la simulación para el material de  $n = 1.74$ , para la red de difracción con una base de resina de 1000nm de grosor. En la figura puede observarse la potencia que se transmite en cada caso, y visualmente sí que se aprecian diferencias para cada caso. En el caso de la capa de 200nm de material de  $n = 1.74$  (**figura 3.24-a**) se ve que la potencia transmitida se confina básicamente en la capa de material y se transmite a través de las columnas, aunque acoplándose bastante potencia también a la base de resina, mientras que en el caso de la capa de 700nm (**figura 3.24-c**) se observa como la potencia se propaga casi únicamente atravesando las columnas de resina, aunque al principio se acopla parte de la potencia a la base también.

De los espectros calculados de los puntos de observación, no se pueden sacar grandes conclusiones. En ningún caso se puede decir que exista un gap, los espectros quedan todos por encima de los 0dB, por lo que se puede decir que no son concluyentes

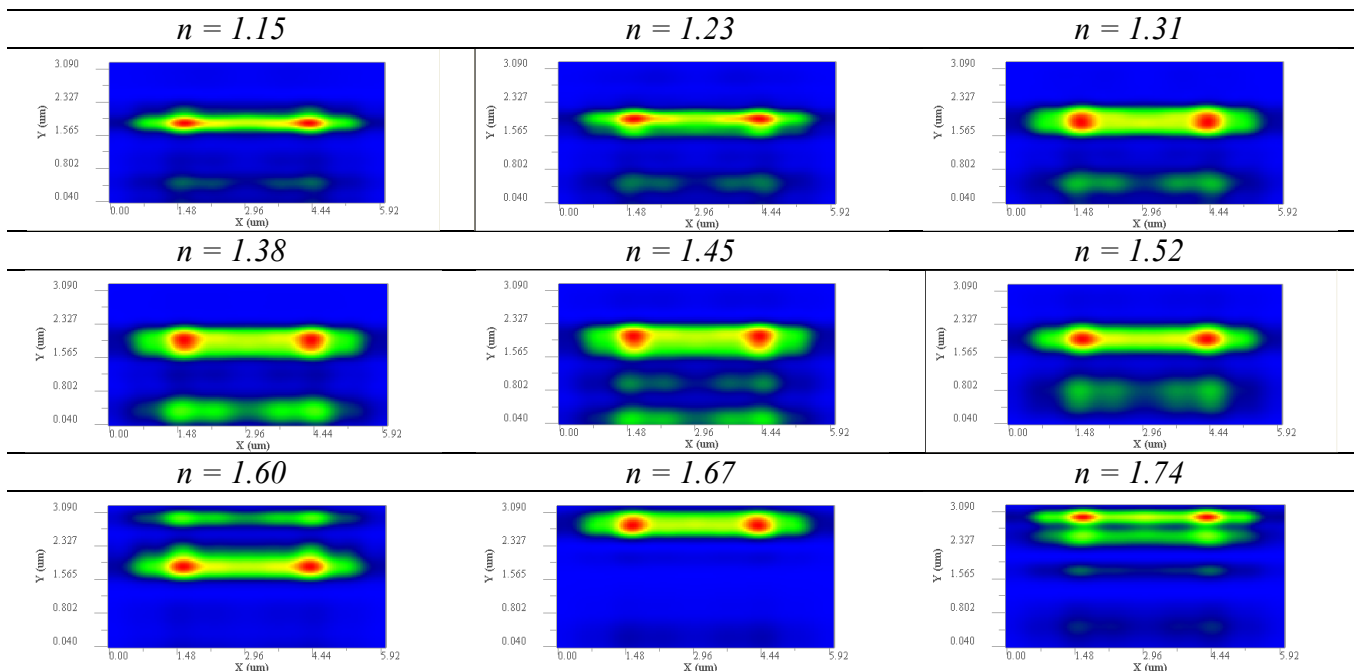
Los resultados espectrales de las simulaciones realizadas para la red de difracción no han mostrado resultados característicos para ningún material ni grosor de la capa del mismo. La influencia de la base actuando como guía minimiza el efecto de filtrado de la red de difracción, y la transmisión es muy grande, lo contrario que pasaba para el caso en el que la base tiene 0nm. En este caso la red de difracción no sería capaz de caracterizar el índice de refracción mediante el resultado espectral, pero sí sería capaz de caracterizarlo en función de la potencia transmitida, puesto que se observa que al aumentar el índice de refracción del material insertado entre las columnas aumenta la potencia transmitida. La caracterización del índice de refracción mediante la potencia transmitida sería viable en todos los casos, por lo que se procede a realizar un estudio al respecto.



## 3.4 Simulaciones 3D de Potencia Transmitida.

Como obtener los resultados de la variación de los gaps con respecto del índice de refracción es complicado y no parece que se haya conseguido caracterizar los gaps apropiadamente, se prefiere estudiar el comportamiento de la red de difracción en transmisión. La idea es la siguiente, transmitir una longitud de onda que la red de difracción no debería permitir su propagación, para después ir añadiendo capas de materiales de otro índice de refracción para que la red de difracción no filtre del todo la luz del láser, y observar la cantidad de potencia que transmite para poder caracterizar la potencia que pasa según el índice de refracción del material que se pone y el grosor de la capa.

En estas simulaciones se ha decidido usar una longitud de onda de 564nm, puesto que es la longitud de onda central de un gap para la estructura del estudio. La banda está situada, según el simulador entre 547-581nm (**Tabla 3.1**, Banda 5,  $w/a = 0.2$ ). La banda se moverá hacia longitudes de onda mayores según se vaya aumentando el índice de refracción del material entre las columnas. En principio, la cantidad de luz recibida a través de las columnas de resina cuando el material tiene un índice de refracción bajo deberá ser muy pequeña debido al efecto del filtrado, para luego ir aumentando conforme aumenta el índice de refracción del material entre las columnas. La posibilidad de hallar otro gap que abarque la longitud de onda que estamos utilizando es pequeña, puesto que habíamos comprobado que los gaps se estrechan a medida que el índice de refracción del material aumenta, al parecer, mirando en las **figuras 3.11 y 3.12** de las bandas, deberían aparecer nuevos gaps cercanos a un índice de refracción de 1.31, y de 1.60, pero como se comprobará en las siguientes graficas, este hecho apenas tiene incidencia en los resultados finales, puesto que predomina el guiado por índice de refracción sobre el filtrado de la longitud de onda seleccionada. A modo de ejemplo de lo que sucederá en las siguientes gráficas, en la **figura 3.25** se muestra la potencia recibida al final de la estructura en el plano perpendicular a la transmisión (plano XY, en  $z = 11.5\mu\text{m}$ ), para la estructura en la que las columnas de 700nm de altura están apoyadas sobre una base de  $1\mu\text{m}$  de grosor, y ésta está apoyada a su vez en una lamina de vidrio. En este caso el material cubre todo el hueco entre las columnas, es decir, la capa tienen un grosor de 700nm.



**Figura 3. 25 Potencia transmitida en función de su posición en el plano XY a través de la red de difracción con una capa de 700nm de grosor de distintos índices de refracción para  $z = 11.5\mu\text{m}$**

Como se ha mencionado anteriormente, la estructura guía el haz de luz por la base (centrado en mitad de la base, pero con un ancho de haz que cubre toda la estructura), esto se ve claramente en todas las vistas de la **figura 3.25**, exceptuando las dos últimas, las correspondientes a los índices de refracción del material de  $n = 1.67$  y  $n = 1.74$ . Hasta el índice de 1.52 se observa como el grueso de la potencia se transmite por la base, y se aprecia cómo se escapa algo de potencia por la parte de abajo, que es vidrio, pero en la siguiente imágenes se ve como la potencia que atraviesa el vidrio disminuye con respecto a la que atraviesa las columnas llenas de material de 1.60. En la imagen del índice de refracción de 1.67 se ve como la mayor parte de la potencia llega a través de las columnas de resina, mientras que por el vidrio y la base pasa una mínima parte de luz, y en la última imagen se ve que la mayor parte de la luz sigue llegando a través de las columnas de resina, pero en menor medida que anteriormente.

### 3.4.1 Simulaciones en Transmisión Base 0nm

En este caso las columnas de resina se apoyan directamente sobre el vidrio, sin ninguna base de resina. Primero observaremos el caso en el que el material ocupa dos séptimas partes del hueco entre las columnas, es decir, una capa de material de 200nm de grosor.

- Capa de 200nm de grosor

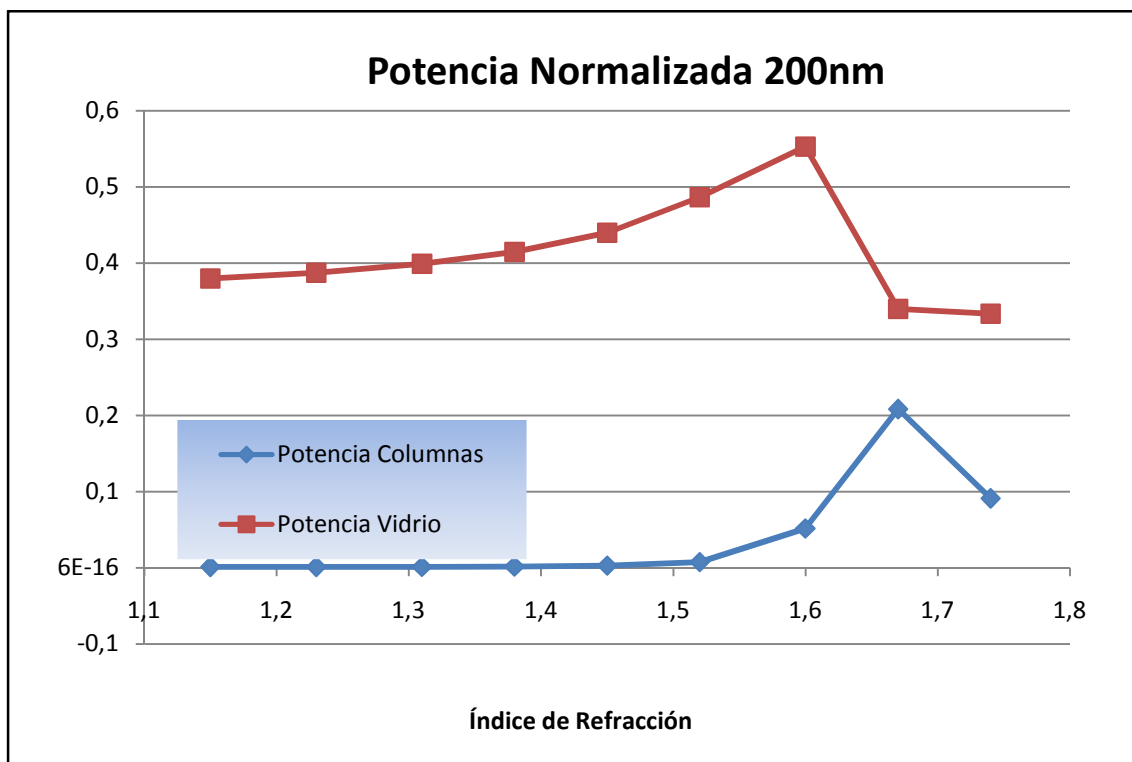


Figura 3. 26 Potencia normalizada para una capa de 200nm en la estructura de base 0nm

En la **figura 3.26** se observa como la potencia transmitida (con respecto a la de la fuente de luz) a la salida de la estructura de 11.5 $\mu$ m de longitud es prácticamente nula cuando los índices de refracción son menores de  $n = 1.54$ , debido principalmente a que la luz se transmite por el vidrio, puesto que al tener un índice de refracción mayor que el material introducido, ésta tenderá a transmitirse por el vidrio.

Destaca en la **figura 3.26** como la potencia transmitida a través de las columnas de resina es prácticamente nula hasta llegar a índices de refracción parecidos a los de la resina ( $n = 1.63$ ), y es en este punto, con un índice de refracción de  $n = 1.67$  cuando se transmite la mayor cantidad de luz, un 20% frente a un 34% que lo hace a través del vidrio. Es este punto el que da el pico de potencia transmitida a través de las columnas de resina, y prácticamente el mínimo de la potencia transmitida por el vidrio. Esto se debe a que las columnas tienen un índice de refracción bastante uniforme entre los huecos y las columnas, y su índice de refracción efectivo es mayor que el del vidrio, y por tanto se guiará la luz a través de la resina.

- **Capa de 500nm de grosor**

A medida que los huecos entre las columnas van llenándose de distintos materiales, el comportamiento general de la potencia transmitida no cambia mucho, sí que lo hace en cuanto a los valores de potencia transmitida, apreciándose como se llega a transmitir más por la sección de las columnas de resina que por la del vidrio.

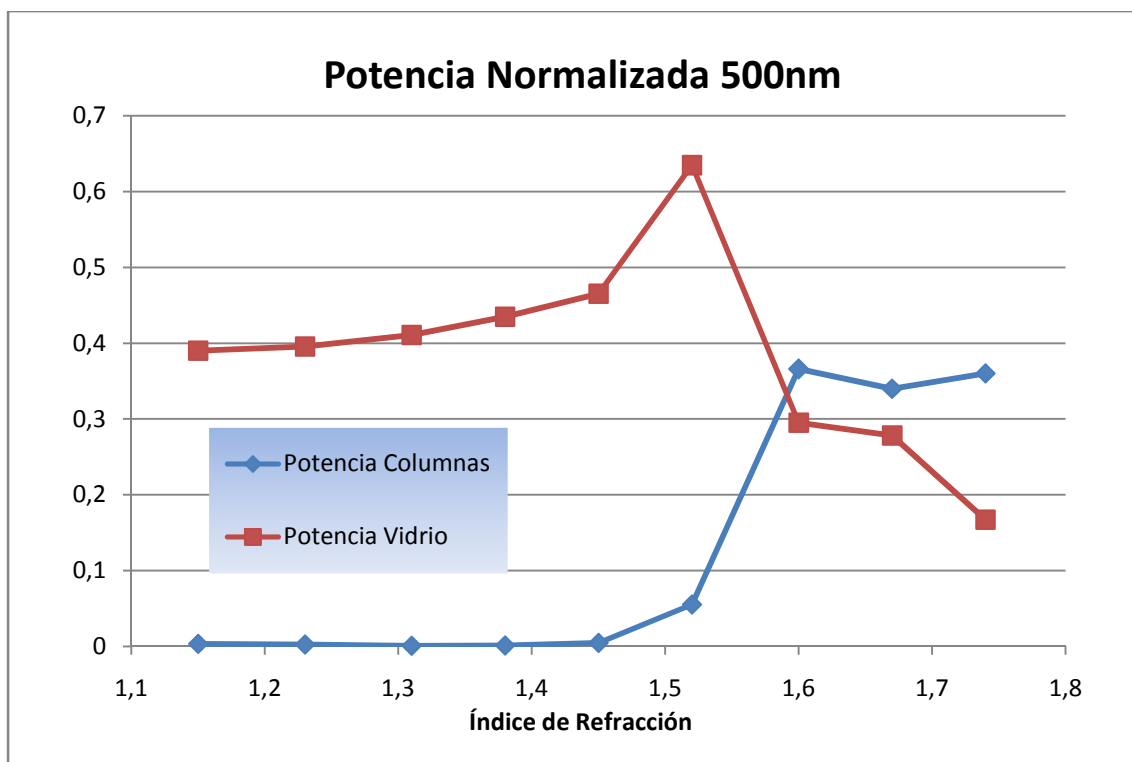


Figura 3. 27 Potencia normalizada para una capa de 500nm en la estructura de base 0nm

En la **figura 3.27** se aprecia la misma tendencia que en el caso anterior. La potencia transmitida a través de las columnas de resina aumenta mucho al sobrepasar el índice de refracción del vidrio, y es entonces cuando la resina empieza a guiar la luz. En este caso, en el que el grosor de la capa de material es de 500nm, la potencia transmitida a través de la resina llega a ser mayor que la potencia transmitida a través del vidrio para índices de refracción superiores a  $n = 1.60$ . De hecho la potencia a través del vidrio baja bruscamente cuando se supera el índice de refracción del vidrio, y continua bajando paulatinamente a medida que aumenta el índice de refracción de la capa de material que hay entre las columnas.

El mínimo de la potencia a través del vidrio se sitúa en el 16.7% para  $n = 1.74$ , en el cual la potencia a través de las columnas muestra un máximo con una transmisión del 36% de la potencia de la fuente de luz.

- **Capa de 700nm de grosor**

El caso en el que el hueco entre las columnas de resina está completamente lleno de otro material no difiere mucho de los casos mostrados anteriormente en el comportamiento general. Esto se puede apreciar en la **figura 3.28**, pero sí que destacan los valores de potencia transmitida que se alcanzan para el caso de las columnas de resina.

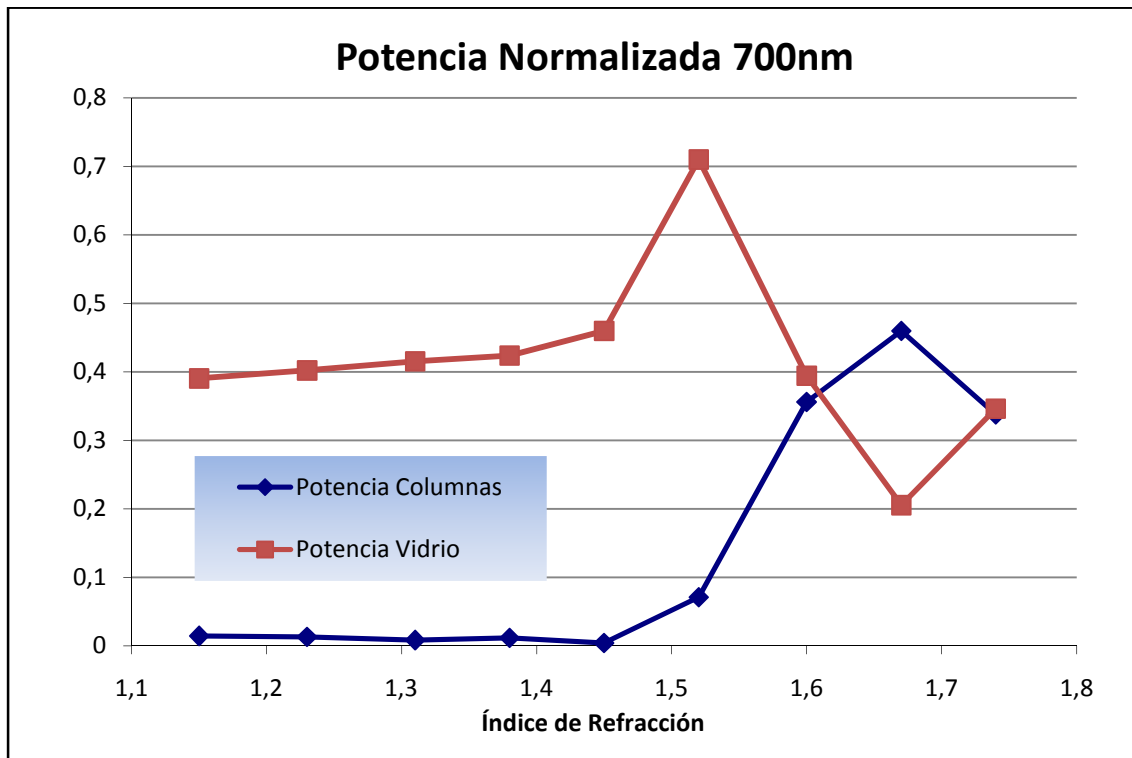


Figura 3. 28 Potencia normalizada para una capa de 700nm en la estructura de base 0nm

En esta gráfica se muestra más claramente el pico de transmisión a través de la resina, que se da para un índice de  $n = 1.67$ , dando lugar a una transmisión del 46%, y que además coincide con el mínimo de transmisión a través del vidrio, de 20.5%. La transmisión a través del vidrio muestra un máximo más acusado que en los casos anteriores, llegando a transmitir el 71% de la potencia emitida por la fuente de luz para  $n = 1.54$ , pero considerando que no se consideran como transmisión sino como pérdidas, deberemos fijarnos principalmente en la potencia que llega al final a través de las columnas de resina.

En este caso se puede caracterizar la potencia transmitida en función del índice de refracción para los casos en los que el material tiene un índice de refracción bastante elevado, puesto que para índices menores de  $n = 1.45$  se puede considerar que la transmisión es nula.

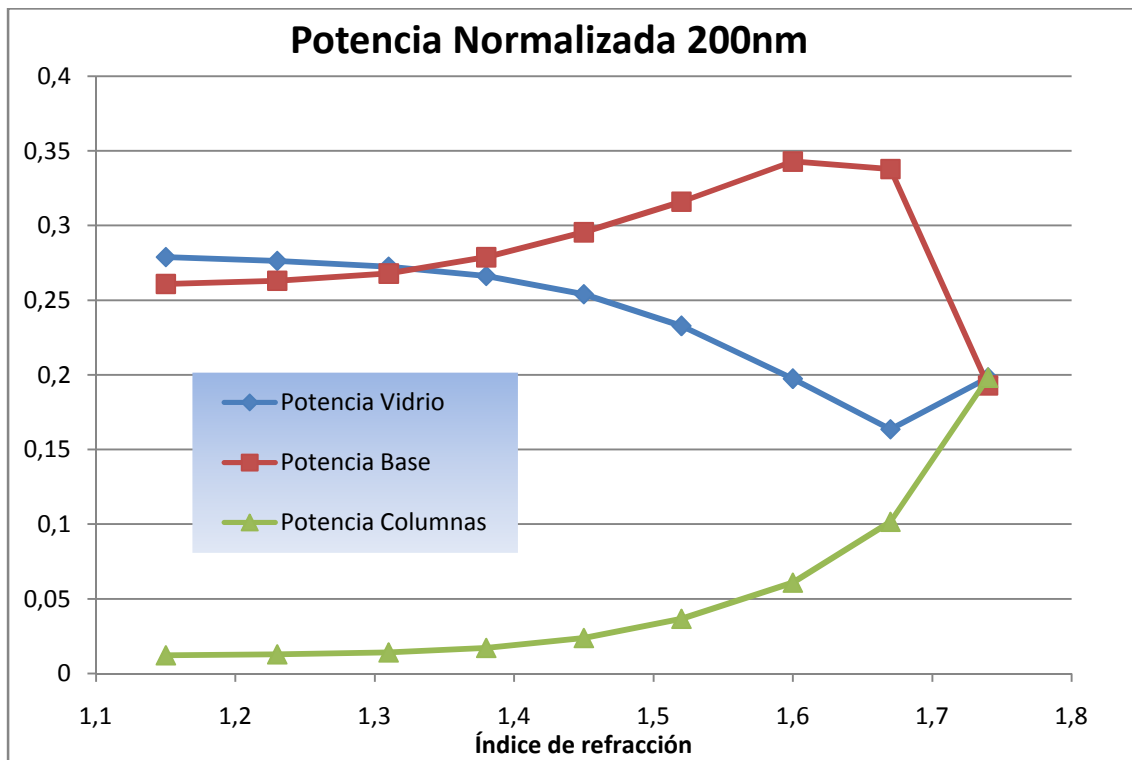
Las únicas diferencias entre las tres simulaciones de la red de difracción cuya base es de 0nm radican principalmente en los valores de potencia transmitida para valores de índice de refracción mayores de 1.45, alcanzándose máximos que varían entre el 20% para el caso de la capa de 200nm y el 46% para el caso de la capa de 700nm.

### 3.4.2 Simulaciones en Transmisión Base 0.5 $\mu$ m

En el caso en el que las columnas de resina están apoyadas sobre una base de 500nm de grosor se han separado las potencias transmitidas en tres partes: La potencia que atraviesa el vidrio, la base (que actúa como guía) y las columnas. El comportamiento esperado es que cuando el índice de refracción es bajo y el grosor de la capa de material situado entre las columnas es pequeño, la potencia que pasará a través de las columnas será pequeña. A medida que el índice de refracción aumente, la potencia transmitida a través de las columnas aumentará, disminuyendo la potencia que atraviesa la base, dependiendo también del grosor de la capa de material que pongamos en el espacio entre las columnas.

- **Capa de 200nm de grosor**

En **figura 3.29** se muestran los resultados obtenidos para la red de difracción que tiene una base de resina de 500nm y el grosor de la capa entre las columnas es de 200nm. Como se ha mencionado anteriormente, se observan las potencias transmitidas a través de las columnas de resina, de la base de resina, y a través del vidrio.



**Figura 3. 29** Potencia normalizada para una capa de 200nm en la estructura de base 500nm

En la **figura 3.29** se aprecia la tendencia esperada de las potencias. La potencia transmitida a través de las columnas, como se puede ver, es muy pequeña para los índices de refracción más bajos, para aumentar conforme aumenta éste. A partir de  $n = 1.45$  se observa la tendencia a aumentar con respecto al índice de refracción. La potencia transmitida a través de la base también aumenta conforme aumenta el índice de refracción, aunque guía mucha más potencia que en el caso de las columnas, como era de esperar, alcanzando un pico del 34.3% para un índice de refracción de  $n = 1.60$ .

La tendencia de la potencia transmitida a través de la base se rompe bruscamente al llegar a un índice de refracción de  $n = 1.60$ , puesto que a partir de ese punto la potencia guiada

baja un poco, para bajar bruscamente hasta un 19.5% cuando el índice de refracción es  $n = 1.74$  (su mínimo).

El máximo de potencia transmitida por la base es de 34.3%, que se da para un índice de refracción de  $n = 1.60$  (próximo al índice de refracción de la resina), mientras que el mínimo de potencia transmitida por la base coincide con el máximo de potencia transmitida a través de las columnas, en el que ambas potencias son prácticamente iguales al 19.5%.

La potencia transmitida a través del vidrio no es relevante, puesto que se consideran pérdidas, pero muestra una tendencia a transmitir menos potencia conforme aumenta el índice de refracción, alcanzando su mínimo para  $n = 1.67$  con un 19.8% de la potencia normalizada. La situación de los máximos y mínimos de cada potencia se corresponde con lo esperado inicialmente.

- **Capa de 500nm de grosor**

En la **figura 3.30** se muestran los resultados obtenidos en la potencia transmitida, normalizada a la fuente de luz, cuando la capa de material entre las columnas es de un grosor de 500nm.

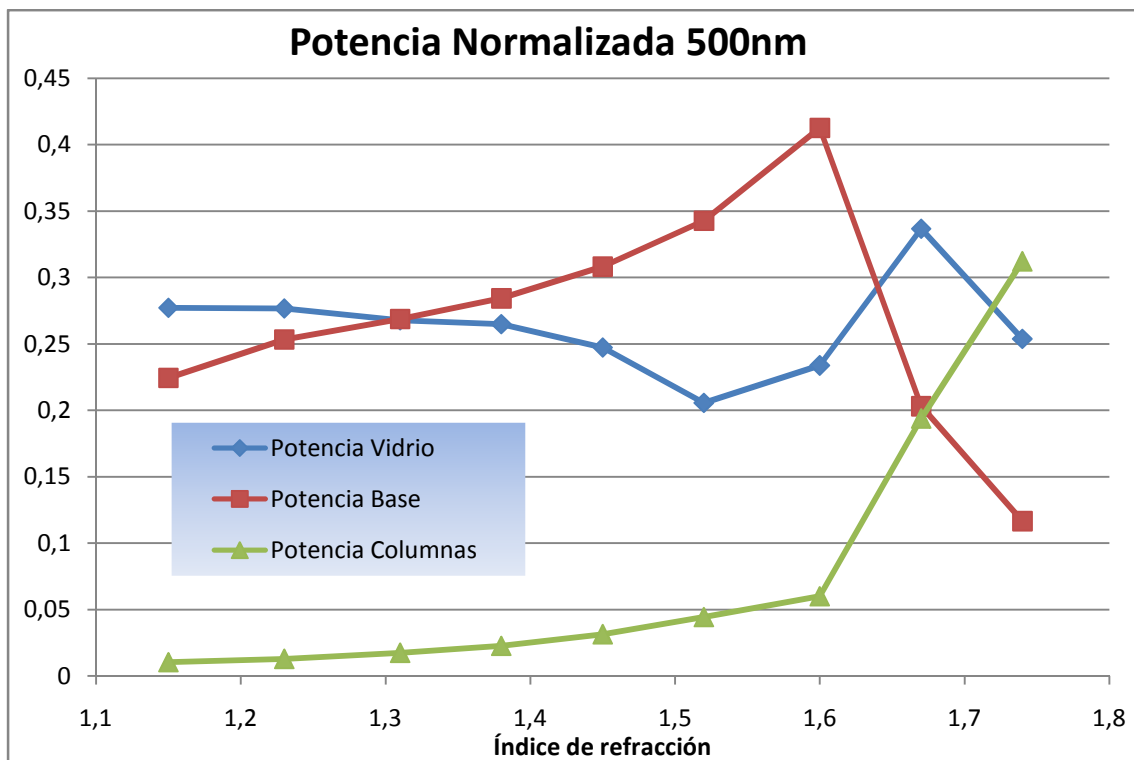


Figura 3. 30 Potencia normalizada para una capa de 500nm en la estructura de base 500nm

En la **figura 3.30** se ven las mismas tendencias que en la **figura 3.29**, pero dándose de forma más acusada. En este caso la potencia máxima transmitida a través de la base vuelve a darse para un índice de refracción de  $n = 1.60$ , siendo la potencia máxima mayor que la potencia máxima del caso anterior con un 41.3%, pero luego la caída es mucho más brusca. Lo mismo pasa con la potencia que atraviesa las columnas de resina, la tendencia de aumentar conforme aumenta el índice de refracción es clara, pero da un salto a partir del índice de refracción de  $n = 1.60$ . Para  $n = 1.60$  las potencias transmitidas en este caso y en el anterior son prácticamente iguales, de un 6% de la potencia total, pero mientras en el caso anterior la subida en el siguiente paso del índice de refracción era mucho más suave, en este caso pega un salto

hasta el 19%, y alcanza el máximo de potencia transmitida para un índice de refracción de  $n = 1.74$  con una potencia transmitida del 31.2%, coincidiendo como se ha mencionado antes, con el mínimo de la potencia transmitida a través de la base, que es del 11.7%.

En el caso de la potencia transmitida a través del vidrio (la recibida en el plano perpendicular a la transmisión) puede observarse que la tendencia es mucho más irregular. La línea comienza a la baja, hasta alcanzar su mínimo para  $n = 1.52$ , cuando la potencia recibida a través del vidrio es del 20.6%, pero después de ese mínimo la potencia vuelve a subir y alcanza el máximo para un índice de refracción de  $n = 1.67$ , con una potencia del 33.7%. En el punto final se observa que vuelve a bajar hasta situarse en valores parecidos a cuando había un índice de refracción bajo.

- **Capa de 700nm de grosor**

En la **figura 3.31** se muestran los resultados obtenidos en la potencia transmitida, normalizada a la fuente de luz, cuando la capa de material entre las columnas es de un grosor de 700nm (la altura de las columnas):

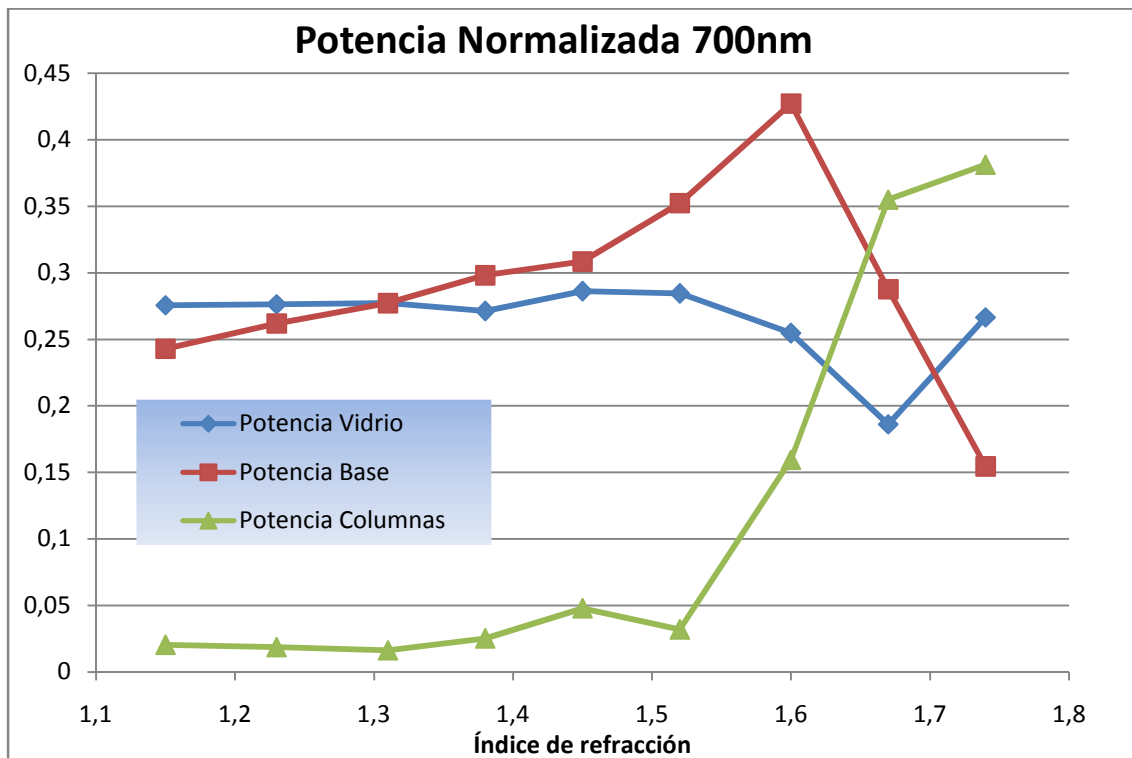


Figura 3. 31 Potencia normalizada para una capa de 700nm en la estructura de base 500nm

En la **figura 3.31** se observa que la potencia transmitida a través de las columnas alcanza su máximo de transmisión con respecto a los casos anteriores. La tendencia de la potencia que se transmite por la base de resina es igual a las anteriores, teniendo su máximo para  $n = 1.60$ , dando una potencia normalizada del 42.7%. A partir de ese punto baja bruscamente hasta alcanzar su mínimo de potencia transmitida para  $n = 1.74$ , con el 15.5%. La tendencia general es como se ha dicho antes similar a los dos casos anteriores.

En cuanto a la potencia transmitida a través de las columnas de resina, ahora llenas completamente de un material distinto del aire, se muestra la mayor transmisión de potencia de los tres casos en los que la base es de 500nm, algo que era de esperar. La transmisión en este

caso muestra una pequeña tendencia al alza en el punto  $n = 1.45$ , pero seguidamente baja levemente para un índice de refracción de  $n = 1.52$ , para luego subir bruscamente en la última parte de la gráfica. El máximo se alcanza para  $n = 1.74$  con una potencia normalizada del 38.1%, pero se aprecia cómo se rompe la tendencia positiva de los dos casos anteriores, en los que el aumento era mucho mayor, por lo que la pendiente de la gráfica disminuye.

En lo que respecta a la potencia transmitida por el vidrio, la tendencia es comparable al caso en el que el material tenía un grosor de 200nm, se mantiene constante hasta llegar a un índice cercano al índice de refracción de la resina, donde baja un poco, alcanzando un mínimo en  $n = 1.67$  con 18.6%, para luego transmitir aproximadamente lo mismo que para índices de refracción menores.



### 3.4.3 Simulaciones en Transmisión Base 1.0 $\mu\text{m}$

En el caso en el que las columnas de resina están apoyadas sobre una base de 1 $\mu\text{m}$  de grosor, como en el caso anterior, se han separado las potencias transmitidas en tres partes: La potencia que atraviesa el vidrio, la base (que actúa como guía) y las columnas. El comportamiento esperado es que cuando el índice de refracción es bajo y el grosor de la capa de material situado entre las columnas es pequeño, la potencia que pasara a través de las columnas será pequeña también. A medida que el índice de refracción aumente, la potencia transmitida a través de las columnas aumentará, disminuyendo la potencia que atraviesa la base, dependiendo también del grosor de la capa de material que pongamos en el espacio entre las columnas.

- **Capa de 200nm de grosor**

En **figura 3.32** se muestran los resultados obtenidos para la red de difracción que tiene una base de resina de 1000nm y el grosor de la capa entre las columnas es de 200nm. Como se ha mencionado anteriormente, se observan las potencias transmitidas a través de las columnas de resina, de la base de resina, y a través del vidrio.

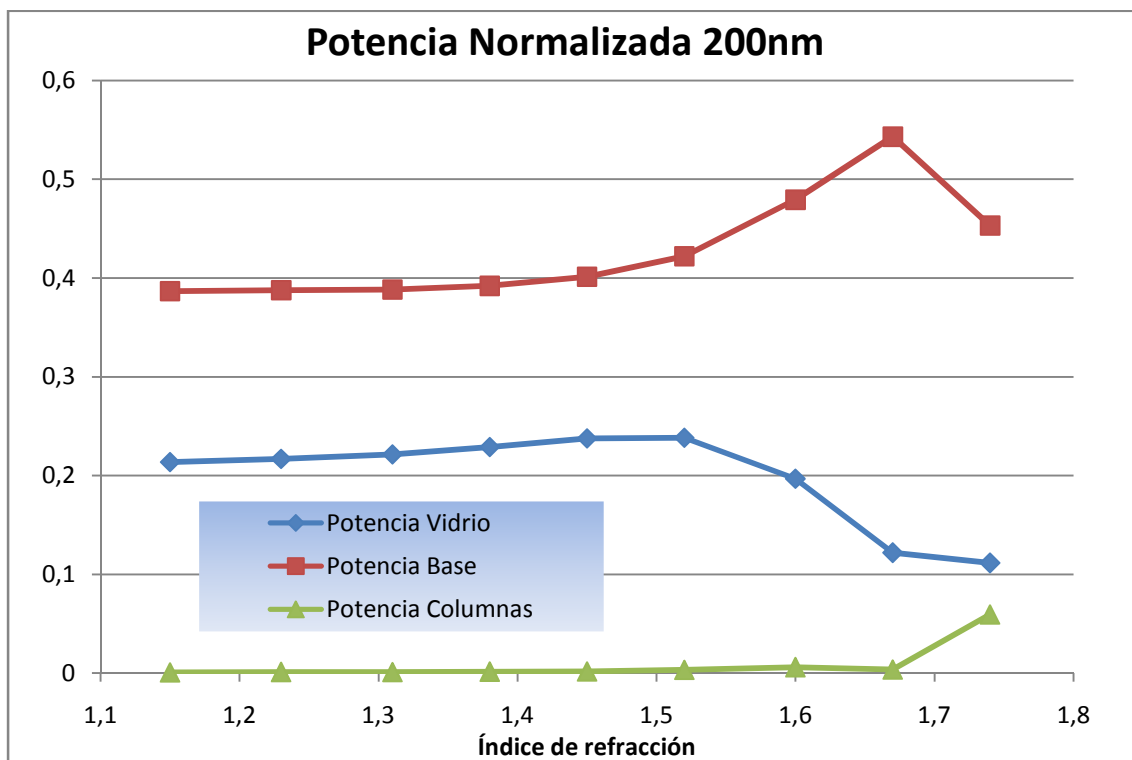


Figura 3. 32 Potencia normalizada para una capa de 200nm en la estructura de base 1000nm

A la vista de la **figura 3.32** se observa una transmisión de potencia muy pequeña para el caso de la potencia transmitida a través de las columnas de resina, menor al 1% para todos los índices de refracción excepto para el caso de  $n = 1,74$ , donde alcanza su máximo de transmisión sin llegar al 6%. En este caso se ve claramente como la base actúa de guía, puesto que la transmisión a través de la base varía del 38,7% para índices de refracción bajos, hasta alcanzar su máximo para  $n = 1,67$  con un 54,3% de la potencia transmitida. La potencia transmitida a través del vidrio muestra una tendencia similar a los casos anteriores, mostrando una tendencia al alza, en este caso pequeña, para disminuir ligeramente cuando tenemos índices de refracción altos.

No se puede decir mucho de estos resultados, solo que la capa de 200nm de grosor tiene una mínima influencia en la transmisión a través de las columnas de resina, aunque sí afecte ligeramente a la transmisión a través de la base.

- **Capa de 500nm de grosor**

En la **figura 3.33** se muestran los resultados obtenidos en la potencia transmitida, normalizada a la fuente de luz, cuando la capa de material entre las columnas es de un grosor de 500nm.

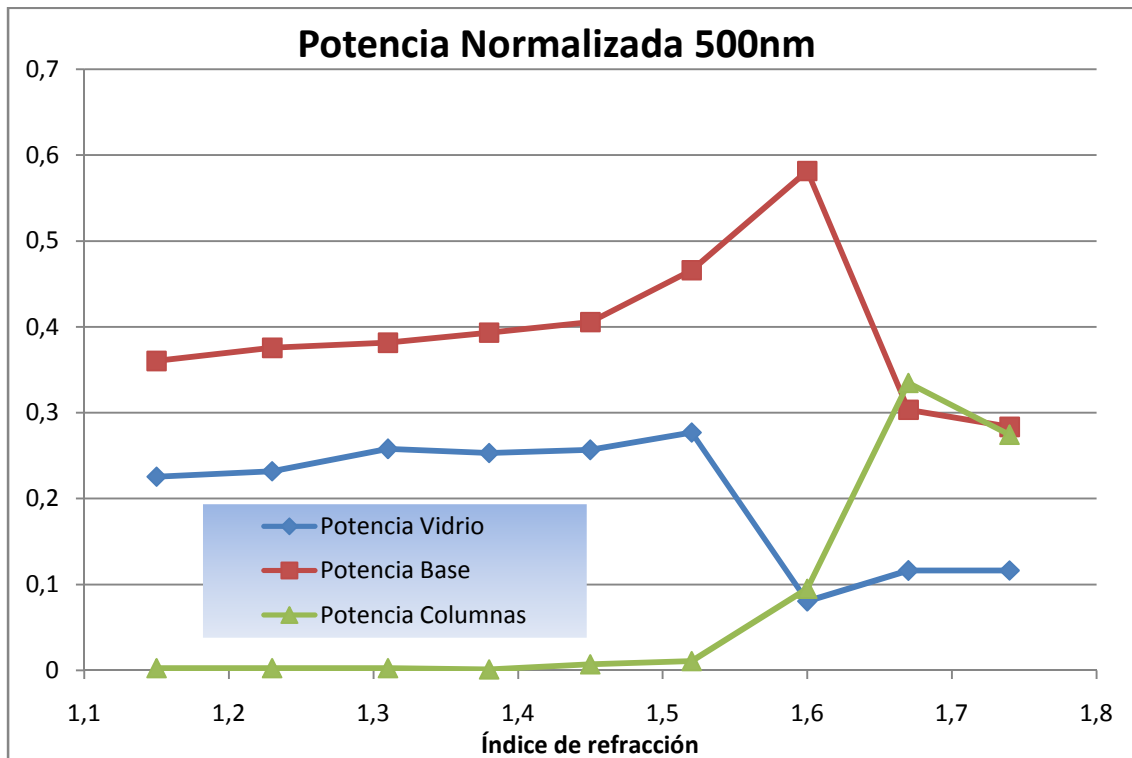


Figura 3. 33 Potencia normalizada para una capa de 500nm en la estructura de base 1000nm

En este caso la influencia de la capa del material entre las columnas es mucho más clara que en caso anterior. La **figura 3.33** muestra que la línea correspondiente a la potencia recibida a través de las columnas muestra variación con respecto al caso anterior. Se observa como aumenta la potencia transmitida a partir del índice de refracción de  $n = 1.60$ , alcanzando un máximo del 33.5%, superior al de la potencia transmitida a través de la base. A partir de ese punto vuelve a bajar para el índice de refracción de  $n = 1.74$  hasta el 27.4%. Para los índices menores de  $n = 1.52$ , la potencia recibida es prácticamente nula, guiándose principalmente por la base de resina.

La potencia transmitida a través de la base sigue aproximadamente el mismo patrón que en el caso anterior, sólo que el máximo de potencia recibida al final del dispositivo se sitúa en un índice de refracción de  $n = 1.60$ , con un 58.2%, para luego bajar a valores por debajo de los valores que se tienen para índices de refracción bajos. El mínimo de potencia transmitida se da para un índice de refracción de  $n = 1.74$ , con un 28.4% de la potencia emitida por la fuente de luz.

En cuanto a la potencia recibida a través del vidrio, lo único destacable es un brusco descenso a partir de un índice de refracción de  $n = 1.60$ , para luego mantenerse aproximadamente a un 12% en los dos puntos siguientes

- **Capa de 700nm de grosor**

En la **figura 3.34** se muestran los resultados obtenidos en la potencia transmitida, normalizada a la fuente de luz, cuando la capa de material entre las columnas es de un grosor de 700nm (la altura de las columnas).

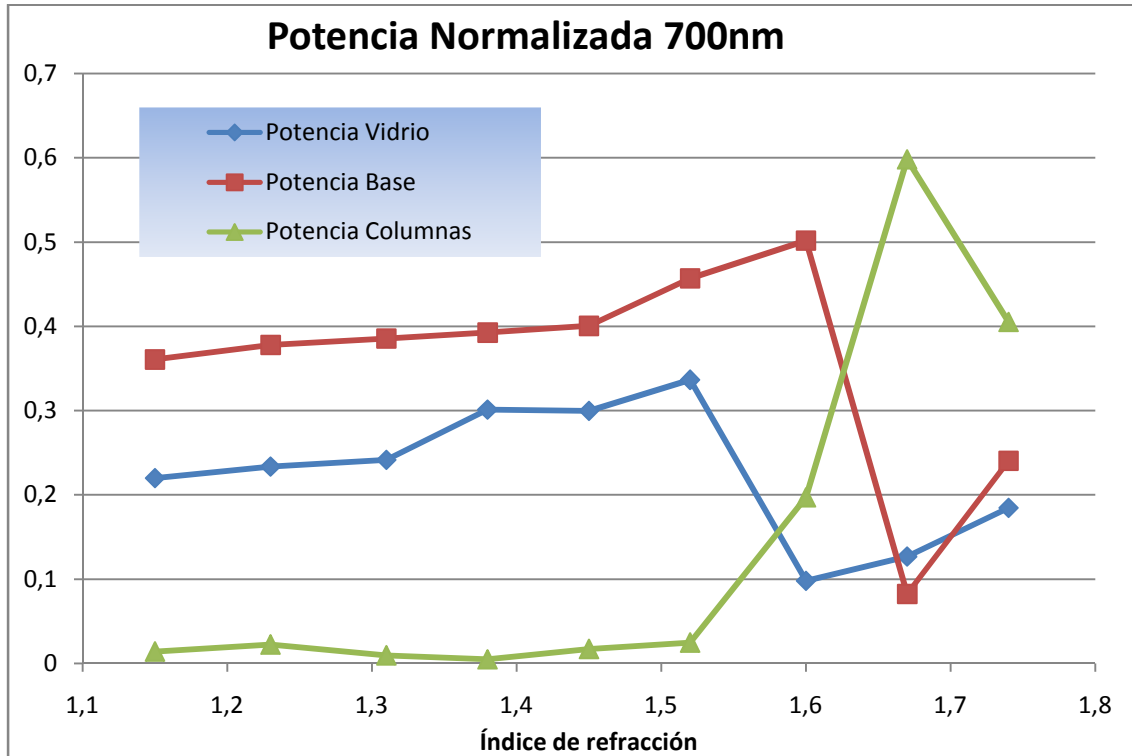


Figura 3. 33 Potencia normalizada para una capa de 700nm en la estructura de base 1000nm

Con el espacio entre las columnas completamente lleno de un material de un índice de refracción diferente al del aire es muy notable la potencia que se llega a transmitir a través de las columnas de resina. Esta potencia tiene un máximo del 59.8% para un índice de refracción de  $n = 1.67$ , por encima incluso de la potencia guiada a través de la base. El máximo alcanzado de 59.8% de la potencia total emitida por la fuente de luz coincide con el mínimo, bastante profundo, de la potencia guiada por la base de resina. En este caso el mínimo es del 8.2%, teniendo en cuenta que en el punto anterior la potencia transmitida a través de la base era del 50.2%, su máximo, la diferencia es muy notable.

La potencia transmitida a través de las columnas sigue el mismo patrón que en los casos anteriores, pero de un modo más marcado. Hasta un índice de refracción de 1.52 la potencia es mínima, por debajo del 5% en todos los casos, para ascender hasta el 19.7% cuando el índice es de  $n = 1.60$ , y alcanzar su máximo en el punto de  $n = 1.67$  con un 59.8%. En el último punto ( $n = 1.74$ ) de la gráfica la potencia vuelve a bajar hasta situarse en el 40.5%.

La potencia guiada por la base muestra un crecimiento continuo hasta el punto  $n = 1.60$ , donde tiene su máximo con el 50.1% de la potencia, para alcanzar el mínimo en el punto de índice de refracción de  $n = 1.67$  con una potencia del 17.8%. Esta caída brusca en la potencia es debida a que el índice de refracción efectivo de la parte de las columnas con el material de  $n = 1.67$  de índice de refracción entre ellas es ligeramente mayor que el de la base con un índice de material de  $n = 1.635$ , por lo que la luz tiende a transmitirse por el material con un índice mayor. Esto no sucede en el último caso, puesto que a pesar de tener un índice efectivo mayor, la diferencia de índices entre el material y la resina impide que aumente aun más el guiado, por

## Capítulo 3. Red de Difracción en Transmisión

---

lo que baja la transmisión de la luz por las columnas, y aumenta la potencia de luz transmitida a través de la base de resina.

La potencia transmitida a través del vidrio sigue mostrando la misma tendencia que en los casos anteriores, aumenta ligeramente hasta el punto de  $n = 1.52$ , para luego bajar apreciablemente en el punto anterior en el que baja la potencia de la base (en este caso  $n = 1.52$ ). A partir de ese punto sigue una tendencia creciente, pero no vuelve a alcanzar los valores que se tenían para índices de refracción bajos.

## Capítulo 3. Red de Difracción en Transmisión

---

Bibliografía del Capítulo 3. Red de Difracción en Transmisión.

[3.1] “Gap maps and intrinsic diffraction losses in one-dimensional photonic crystal slabs”, Dario Gerace, Lucio Claudio Andreani.

[3.2] “Photonic crystal book. Molding the flow of light”, John D. Joannopoulos, Steven G. Johnson, Joshua N. Winn, Robert D. Meade.



# [Capítulo 4. Difracción de Fraunhofer ]





En este capítulo se llevará a cabo el estudio de la caracterización del índice de refracción mediante los patrones de difracción en campo lejano con el paquete software **OptiFDTD 8.0** y **Matlab**.

Se hará una breve introducción teórica de los fundamentos físicos y matemáticos de la difracción de Fraunhofer, basada en la aproximación de Fraunhofer que es válida cuando la distancia es mucho mayor que la longitud de onda de estudio.

En el siguiente apartado se realizará un breve estudio de los resultados esperados para la difracción en campo lejano mediante el uso del programa Matlab, para la red estudiada en el Capítulo 3. Para terminar el capítulo se mostrará el estudio realizado con el software OptiFDTD 8.0, el cual incluye una herramienta de análisis en campo lejano, basada también en la aproximación de Fraunhofer [4.1].

### 4.1 Difracción de Fraunhofer.

La difracción de Fraunhofer hace referencia a cierta aproximación de la teoría más general de la difracción escalar. Esta aproximación permitirá reducir los cálculos de patrones de difracción a cálculos matemáticos simples [4.2].

La aproximación que se va a utilizar para introducir el concepto de difracción de Fraunhofer hace necesaria la introducción del concepto de intensidad de una onda electromagnética, y del principio de Huygens-Fresnel, puesto que dicha aproximación deriva de ellas, conceptos que serán presentados para utilizar la aproximación más adelante.

#### 4.1.1 Intensidad de un Campo de Onda Electromagnética.

En la región óptica del espectro, un fotodetector responde directamente a la potencia óptica que llega a su superficie. Para un detector de semiconductor, si la potencia  $P$  incide en la región fotosensible, la absorción de un fotón genera un electrón en la banda de conducción y un hueco en la banda de valencia. Bajo la influencia de los campos internos y aplicados, el hueco y el electrón se mueven en direcciones opuestas, creando una fotocorriente  $i$  que es la respuesta al fotón incidente que es absorbido. Generalmente, bajo la mayor parte de las circunstancias, la fotocorriente es linealmente proporcional a la potencia incidente.

$$i = \mathcal{R}P.$$

La constante  $\mathcal{R}$  se llama reponsividad del detector, y viene dada por,

$$\mathcal{R} = \frac{\eta_{qe}q}{h\nu}$$

Donde  $\eta_{qe}$  es la eficiencia cuántica del fotodetector (el número medio de pares electrón-hueco liberados por la absorción de un fotón, menor que la unidad para detectores pasivos),  $q$  es

la carga del electrón ( $1.602 \times 10^{-19}$  C),  $h$  es la constante de Planck ( $6.626196 \times 10^{-34}$  julios-segundo), y  $\nu$  es la frecuencia óptica.

Esto resulta en óptica que la magnitud directamente medible es la potencia óptica, y es importante relacionar esa potencia con los campos escalares complejos  $u(P,t)$  y  $U(P)$  de la teoría de difracción. Para entender esta relación se requiere una descripción electromagnética del problema. Sin entrar en demasiados detalles, se considera el medio isotrópico y la onda monocromática. Asumiendo que la onda se comporta *localmente* como una onda electromagnética plana y transversal (es decir,  $\vec{\mathcal{E}}$ ,  $\vec{\mathcal{H}}$  y  $\vec{k}$  forman una terna ortogonal), entonces los campos eléctricos y magnéticos pueden expresarse localmente como:

$$\vec{\mathcal{E}} = \text{Re}\{\vec{E}_0 \exp[-j(2\pi\nu t - \vec{k} \cdot \vec{r})]\}$$

$$\vec{\mathcal{H}} = \text{Re}\{\vec{H}_0 \exp[-j(2\pi\nu t - \vec{k} \cdot \vec{r})]\}$$

Con  $\vec{E}_0$  y  $\vec{H}_0$  localmente constantes que tienen componentes complejos. La potencia fluye en la dirección del vector  $\vec{k}$  y la densidad de potencia puede expresarse como:

$$p = \frac{\vec{E}_0 \cdot \vec{E}_0^*}{2\eta} = \frac{E_{0x}^2 + E_{0y}^2 + E_{0z}^2}{2\eta}$$

Donde  $\eta$  es la *impedancia característica* del medio y viene dada por:

$$\eta = \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon}}$$

En el vacío,  $\eta$  es igual a  $377\Omega$ . La potencia total incidente en una superficie de área  $A$  es la integral de la densidad de potencia sobre  $A$ , teniendo en cuenta que la dirección del flujo de potencia es en la dirección de  $\vec{k}$ ,

$$P = \iint_A p \frac{\vec{k} \cdot \hat{n}}{|\vec{k}|} dx dy$$

Aquí  $\hat{n}$  es un vector unitario de la superficie del detector, mientras  $\vec{k}/|\vec{k}|$  es el vector unitario en la dirección del flujo de potencia. Cuando  $\vec{k}$  es normal a la superficie, la potencia total  $P$  es simplemente la integral de la densidad de potencia  $p$  sobre el área del detector.

La proporcionalidad de la densidad de potencia con el cuadrado de la magnitud del vector  $\vec{E}_0$  como se ha podido ver más arriba, nos lleva a definir la intensidad de una onda monocromática escalar en el punto  $Q$  como el cuadrado de la magnitud del fasor complejo,  $U(Q)$ , que representa la perturbación.

$$I(Q) = |U(Q)|^2$$

Hay que notar que la densidad de potencia y la intensidad no son idénticas, pero la segunda es proporcional a la primera. Por esta razón se considera la intensidad como el atributo físicamente medible de un frente de onda óptico.

Cuando la onda no es perfectamente monocromática, pero es de banda estrecha, una generalización directa del concepto de intensidad viene dado por:

$$I(Q) = \langle |U(Q, t)|^2 \rangle$$

Donde los corchetes angulados significan media de tiempo infinito (infinite time average). En algunos casos, el concepto de intensidad instantánea es útil, definida como:

$$I(Q, t) = \langle |U(Q, t)|^2 \rangle$$

Cuando se esté calculando el patrón de difracción, se considerara la intensidad del patrón como la magnitud buscada.

### 4.1.2 El Principio de Huygens-Fresnel en Coordenadas Rectangulares.

Antes de introducir la aproximación utilizada en el caso de la difracción de Fraunhofer, convendría explicar el principio del que se hará dicha aproximación, es decir, explicar de una forma explícita el principio de Huygens-Fresnel para coordenadas rectangulares. En la **figura 4.1**, la apertura se sitúa en el plano  $(\xi, \eta)$ , y es iluminada en la dirección positiva  $z$ . Se calculara el campo de onda en el plano  $(x, y)$ , que es paralelo al plano  $(\xi, \eta)$  y a una distancia  $z$  de él.

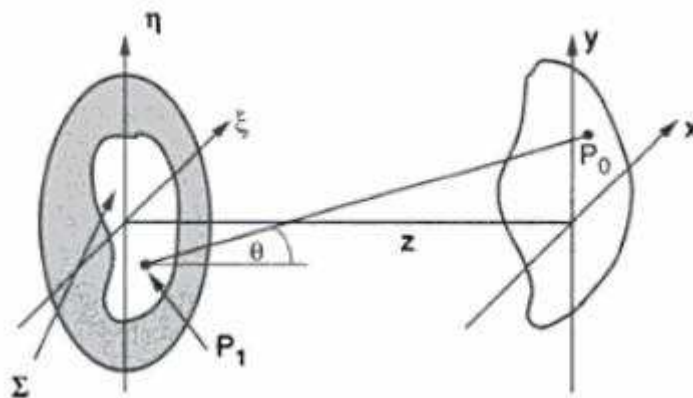


Figura 4. 1 Base de coordenadas para la explicación del principio de Huygens-Fresnel

El eje  $z$  une ambos planos por el origen. El principio de Huygens-Fresnel se puede definir de este modo:

$$U(P_0) = \frac{1}{j\lambda} \iint_{\Sigma} U(P_1) \frac{\exp(jkr_{01})}{r_{01}} \cos \theta \, ds$$

Donde  $\theta$  es el ángulo entre la normal saliente  $\hat{n}$  y el vector  $\vec{r}_{01}$  que va desde  $P_0$  a  $P_1$ . El término  $\cos \theta$  viene dado exactamente por:

$$\cos \theta = \frac{z}{r_{01}}$$

Y por tanto, el principio de Huygens-Fresnel se puede reescribir de esta forma:

$$U(x, y) = \frac{z}{j\lambda} \iint_{\Sigma} U(\xi, \eta) \frac{\exp(jkr_{01})}{r_{01}^2} d\xi d\eta$$

Donde la distancia  $r_{01}$  viene dada exactamente por:

$$r_{01} = \sqrt{z^2 + (x - \xi)^2 + (y - \eta)^2}$$

Para alcanzar esta expresión han sido necesarias dos aproximaciones, una la inherente a la teoría escalar, y la segunda viene de asumir que la distancia de observación desde la apertura es mucho mayor que longitud de onda, es decir,  $r_{01} \gg \lambda$ . En este punto se introduce la aproximación que nos llevara a definir la difracción de Fraunhofer.

### 4.1.3 La Aproximación de Fraunhofer.

Así como la aproximación de Fresnel se basa en la expansión binomial truncada a sus dos primeros términos [4.2], la aproximación de Fraunhofer, cuando es válida, simplifica enormemente los cálculos. Esta aproximación, cuando se cumplen las condiciones de la aproximación de Fresnel, es válida cuando se cumple la siguiente condición:

$$z \gg \frac{k(\xi^2 + \eta^2)_{max}}{2}$$

El campo observado corresponde directamente a la Transformada de Fourier de la distribución de la apertura. Esto se obtiene en la llamada región de la Difracción de Fraunhofer (o equivalentemente, en el campo lejano).

$$U(x, y) = \frac{e^{jkz} e^{j\frac{k}{2z}(x^2 + y^2)}}{j\lambda z} \iint_{-\infty}^{\infty} U(\xi, \eta) \exp\left[-j\frac{2\pi}{\lambda z}(x\xi + y\eta)\right] d\xi d\eta$$

Dejando de lado los factores de fase multiplicativos de la integral, esta expresión es simplemente la transformada de Fourier de la distribución de la apertura, evaluadas a las frecuencias:

$$f_X = \frac{x}{\lambda z}$$

$$f_Y = \frac{y}{\lambda z}$$

A frecuencias ópticas, las condiciones requeridas para que la aproximación de Fraunhofer sea válida pueden ser bastante severas, así por ejemplo, para una longitud de onda de 600 nm (luz roja) y una apertura de 2.5 cm de ancho, la distancia de observación debería ser mucho mayor que 2600 metros. En nuestro caso las aperturas, o más bien, la red de difracción que se va a estudiar tiene unas medidas mucho más pequeñas que en el ejemplo anterior, así, en este caso, la apertura de las rendijas será de 42μm, por lo tanto, la distancia a considerar como

campo lejano se reduce considerablemente a unos 1.8cm. Por tanto, la red de difracción considerada cumplirá las condiciones de campo lejano cuando se sitúe el fotodetector a una distancia mayor que los 1.8cm calculados.

### Ejemplo: Difracción de Fraunhofer para una apertura rectangular.

En el ejemplo de una apertura rectangular, la transmitancia viene dada por:

$$t_A(\xi, \eta) = \Pi\left(\frac{\xi}{2w_X}\right) \Pi\left(\frac{\eta}{2w_Y}\right)$$

Las constantes  $2w_X$  y  $2w_Y$  indican el tamaño de la apertura en las direcciones  $\xi$  y  $\eta$ . Si la apertura está iluminada por una amplitud unitaria, incidente a la normal, frente de onda monocromático, entonces la distribución de campo en la apertura es igual a la función  $t_A$ . Por tanto el patrón de difracción de Fraunhofer será:

$$U(x, y) = \frac{e^{jkz} e^{j\frac{k}{2z}(x^2+y^2)}}{j\lambda z} \mathcal{F}\{U(\xi, \eta)\} \Big|_{f_X=x/\lambda z, f_Y=y/\lambda z}$$

Notando que  $\mathcal{F}\{U(\xi, \eta)\} = A \text{sinc}(2w_X f_X) \text{sinc}(2w_Y f_Y)$ , donde A es el área de la apertura ( $4w_X w_Y$ ). Por tanto:

$$U(x, y) = \frac{e^{jkz} e^{j\frac{k}{2z}(x^2+y^2)}}{j\lambda z} A \text{sinc}\left(\frac{2w_X x}{\lambda z}\right) \text{sinc}\left(\frac{2w_Y y}{\lambda z}\right)$$

Dando como resultado la intensidad:

$$I(x, y) = \frac{A^2}{\lambda^2 z^2} \text{sinc}^2\left(\frac{2w_X x}{\lambda z}\right) \text{sinc}^2\left(\frac{2w_Y y}{\lambda z}\right)$$

Este resultado se muestra en **figura 4.2**.

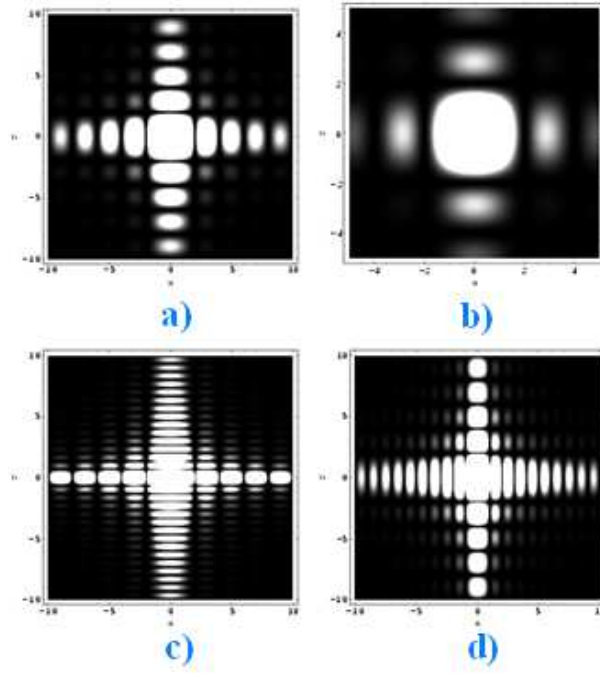


Figura 4. 2 Difracción de Fraunhofer para cuatro aperturas cuadradas y rectangulares diferentes

La **figura 4.2-a** muestra la difracción en campo lejano provocada por una apertura cuadrada, donde  $w_X = w_Y$ , la **figura 4.2-b** muestra la difracción en campo lejano que provoca una apertura cuadrada, pero de mitad de anchura que la anterior. Las **figuras 4.2-c** y **4.2-d** muestran dos aperturas rectangulares, la **figura 4.2-c** con  $w_Y = 2w_X$ , y la **figura 4.2-d** con  $w_X = 2w_Y$ .

#### 4.1.4 Rejilla Delgada de Fase Sinusoidal. (Thin Sinusoidal Phase Grating)

Este ejemplo de cálculos de difracción de Fraunhofer se utilizará para aproximarnos a nuestra rejilla. Se define la función de transmitancia de la amplitud como:

$$t_A(\xi, \eta) = \exp \left[ j \frac{m}{2} \sin(2\pi f_0 \xi) \right] \Pi \left( \frac{\xi}{2w} \right) \Pi \left( \frac{\eta}{2w} \right)$$

Donde, escogiendo adecuadamente la referencia de la fase, se obtiene un factor que representa el retardo de fase medio a través de la red (rejilla). El parámetro  $m$  representa la excursión del retardo de fase pico a pico.

Si la red está iluminada uniforme y unitariamente, con el frente de onda incidiendo normal a la red, entonces la distribución inmediatamente después de la red viene dada por la ecuación escrita un párrafo más arriba. El análisis se simplifica si usamos esta identidad:

$$\exp \left[ j \frac{m}{2} \sin(2\pi f_0 \xi) \right] = \sum_{q=-\infty}^{\infty} J_q \left( \frac{m}{2} \right) \exp(2\pi q f_0 \xi)$$

Con  $J_q$  una función de Bessel de primera especie y orden  $q$ . Se deduce:

$$\mathcal{F}\left\{\exp\left[j\frac{m}{2}\sin(2\pi f_0\xi)\right]\right\} = \sum_{q=-\infty}^{\infty} J_q\left(\frac{m}{2}\right)\delta(f_x - qf_0, f_y)$$

Desarrollando respecto a la función de la transmitancia obtenemos:

$$\begin{aligned}\mathcal{F}\{U(\xi, \eta)\} &= \mathcal{F}\{t_A(\xi, \eta)\} \\ &= [A \operatorname{sinc}(2wf_x)\operatorname{sinc}(2wf_y)] \otimes \left[ \sum_{q=-\infty}^{\infty} J_q\left(\frac{m}{2}\right)\delta(f_x - qf_0, f_y) \right] \\ &= \sum_{q=-\infty}^{\infty} AJ_q\left(\frac{m}{2}\right)\operatorname{sinc}[2w(f_x - qf_0)]\operatorname{sinc}(2wf_y)\end{aligned}$$

Por tanto, el patrón de difracción de Fraunhofer puede escribirse así:

$$U(x, y) = A \frac{e^{jkz} e^{j\frac{k}{2z}(x^2+y^2)}}{j\lambda z} \sum_{q=-\infty}^{\infty} J_q\left(\frac{m}{2}\right)\operatorname{sinc}\left[\frac{2w}{\lambda z}(x - qf_0\lambda z)\right]\operatorname{sinc}\left(\frac{2wy}{\lambda z}\right)$$

Ahora, si asumimos que hay muchos periodos de la red dentro de los límites de la apertura ( $f_0 \gg 1/w$ ), entonces el solapamiento de los diferentes términos difractados es despreciable, y el patrón de intensidad correspondiente se convierte en:

$$I(x, y) \approx \left(\frac{A}{\lambda z}\right)^2 \sum_{q=-\infty}^{\infty} J_q^2\left(\frac{m}{2}\right)\operatorname{sinc}^2\left[\frac{2w}{\lambda z}(x - qf_0\lambda z)\right]\operatorname{sinc}^2\left(\frac{2wy}{\lambda z}\right)$$

Se aprecia que la red de difracción de fase sinusoidal difracta la energía a órdenes más altos. La intensidad pico del orden  $q$  es  $(AJ_q(m/2)/\lambda z)^2$ , mientras el desplazamiento de ese orden respecto al centro del patrón de difracción es  $qf_0\lambda z$ . La **figura 4.3** muestra la sección transversal del patrón de intensidad cuando el retardo pico a pico de la fase  $m$  es de 8 radianes. Las amplitudes de los picos de la grafica mostrada son simétricas con respecto al de orden cero.

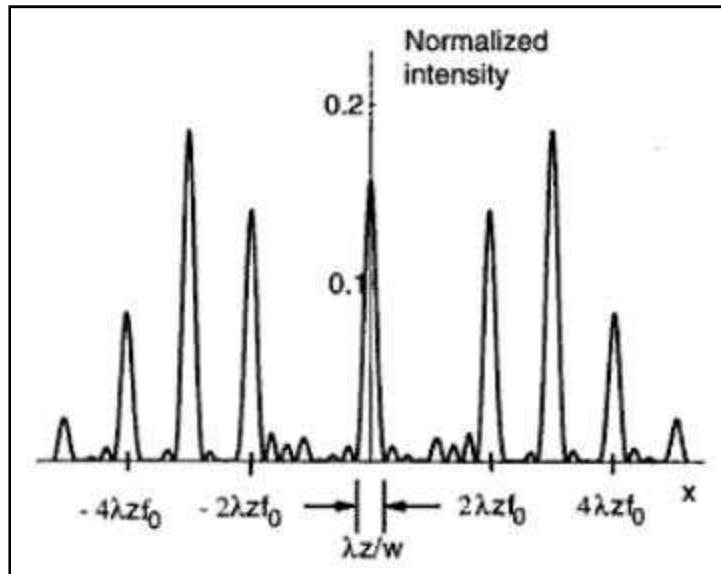


Figura 4. 3 Patrón de difracción de una rejilla delgada de fase sinusoidal de  $m = 8$  rad

La eficiencia de la difracción de esta red se puede encontrar determinando el cuadrado de los coeficientes dados por la función de Bessel. Se calcula la eficiencia de la difracción del orden  $q$  de la red como:

$$\eta_q = J_q^2\left(\frac{m}{2}\right)$$

En la figura 4.4 se muestra el cálculo de esta eficiencia frente a  $m/2$ .

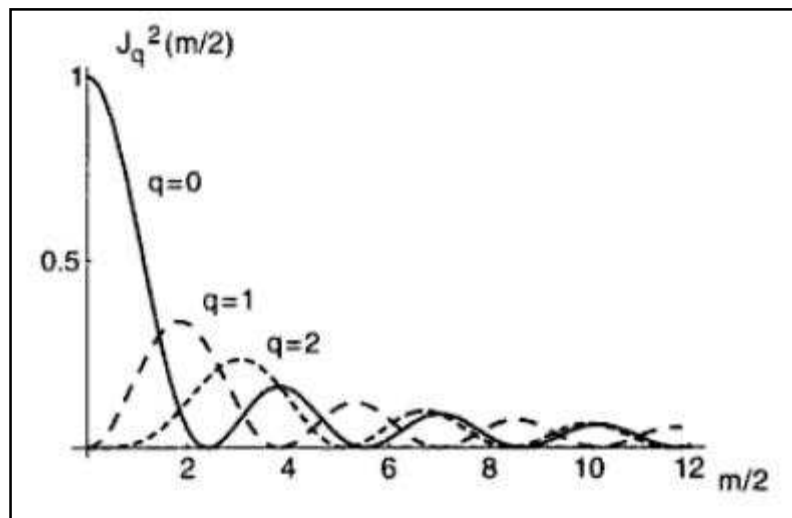


Figura 4. 4 Eficiencia de la difracción para una rejilla delgada de fase sinusoidal

Saber estos coeficientes para estos órdenes  $q$  puede ayudar para el cálculo de la variabilidad mostrada por la red de refracción cuando se le depositan distintos materiales entre las columnas de resina.



## 4.2 Cálculos con Matlab.

Utilizando la ecuación de la intensidad obtenida en el apartado 4.1.4 **Rejilla Delgada de Fase Sinusoidal** se realizan varias gráficas comprobando cómo se comportan los cinco primeros órdenes del resultado. Los resultados se normalizan, puesto que al tener siempre el mismo factor multiplicativo, este puede despreciarse para el análisis que nos interesa. Se relaciona el parámetro  $m$  representa la excursión del retardo de fase pico a pico con la altura de la columna de la red de difracción con la siguiente ecuación:

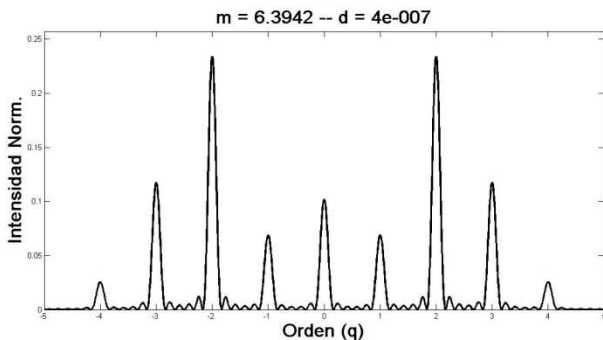
$$m = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta = \frac{2\pi}{\lambda} nd \underbrace{\sin\theta}_1 = \frac{2\pi}{\lambda} nd$$

Donde  $\Delta$  representa la diferencia de camino óptico de dos rayos debido a la red de difracción, que se puede desarrollar como  $nds\sin\theta$ , siendo  $n$  el índice de refracción del material de la red de difracción,  $d$  la altura de las columnas, y  $\sin\theta$  la incidencia del haz de luz sobre la red de difracción, en este caso es la unidad por ser esta incidencia perpendicular a la red.

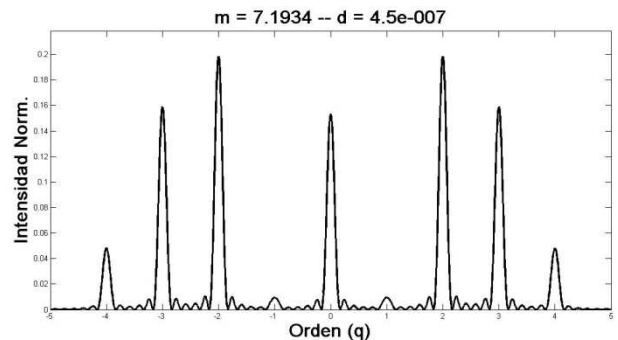
Por tanto, operando sobre la ecuación obtenemos la altura de las columnas,  $d$ , en función de  $m$ :

$$d = \frac{\lambda}{2\pi n} m$$

Tras estas anotaciones, se comprueba como varían los picos de la fórmula en función de la altura de las columnas de la red de difracción, con incrementos de 50nm:

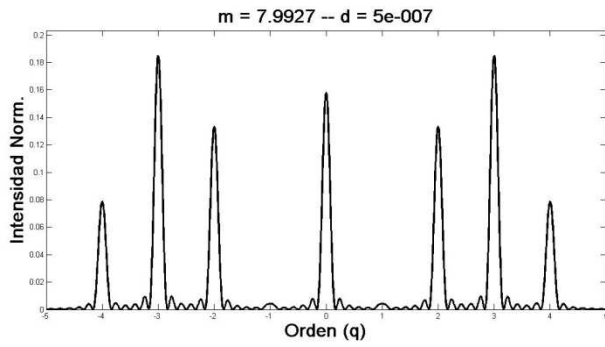


a) Altura columna 400nm

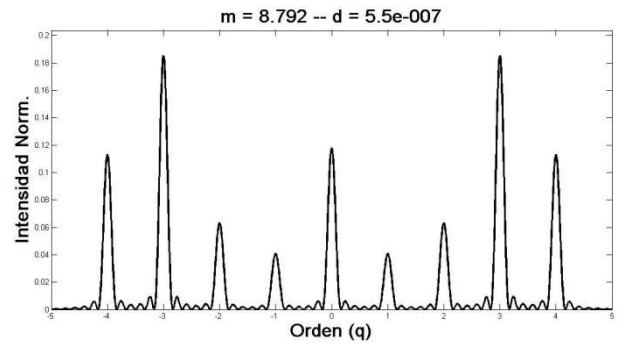


b) Altura columna 450nm

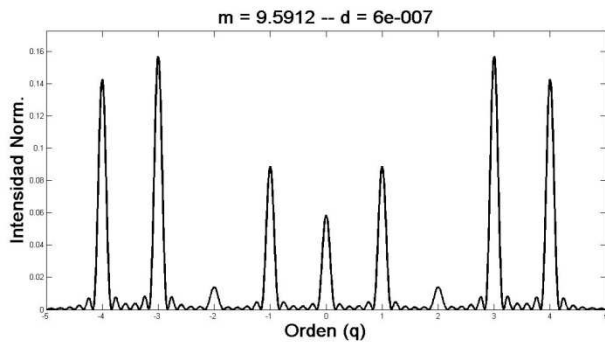
## Capítulo 4. Difracción de Fraunhofer



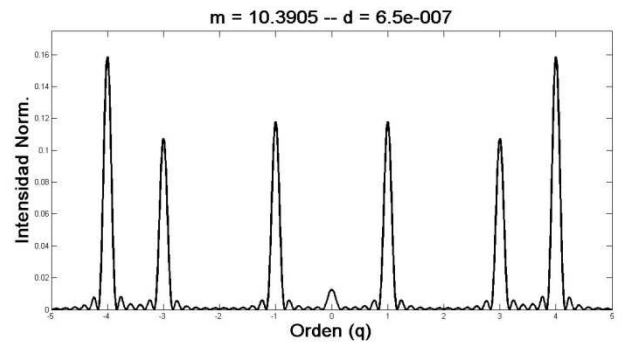
c) Altura columna 500nm



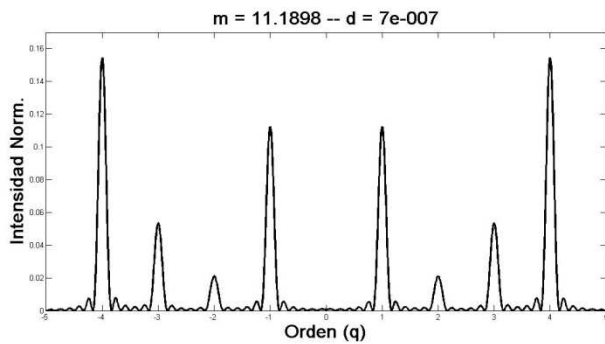
d) Altura columna 550nm



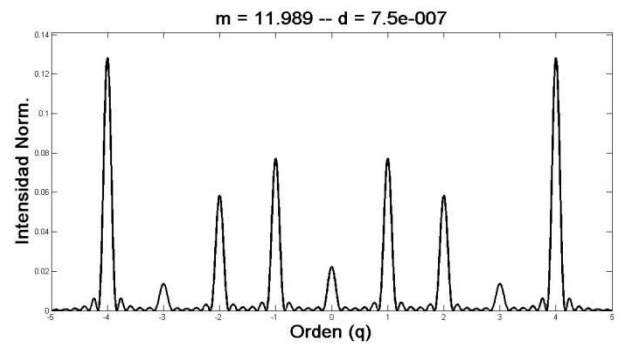
e) Altura columna 600nm



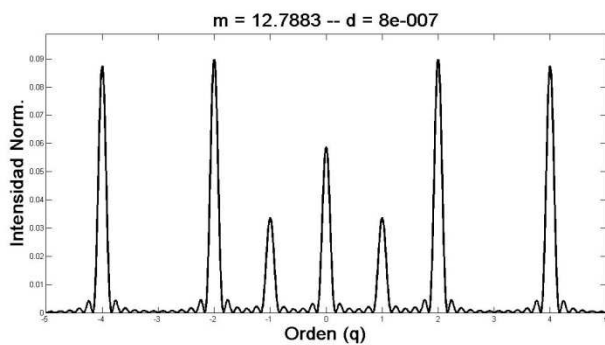
f) Altura columna 650nm



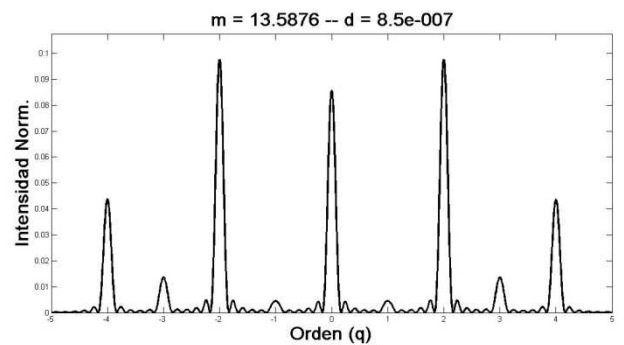
g) Altura columna 700nm



h) Altura columna 750nm



i) Altura columna 800nm

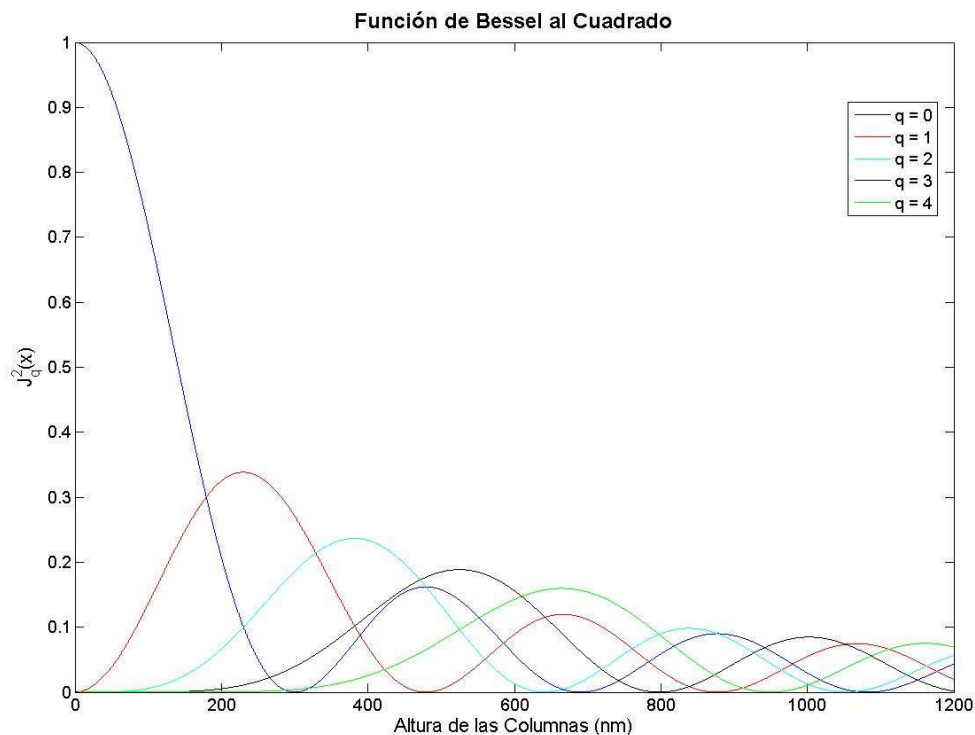


j) Altura columna 850nm

Figura 4. 5 Evolución del patrón de difracción transversal en campo lejano con la altura de las columnas y con el retardo pico a pico de la fase

En las graficas de la **figura 4.5** se observa la dependencia de la altura de las columnas de la red con la transformada óptica de Fourier. Según la ecuación final de la teoría, cada factor viene determinado principalmente por el término  $J_q^2$ , puesto que al estar multiplicado por un factor constante  $\left(\frac{A}{\lambda z}\right)^2$  distinto de cero, que para el caso de las gráficas anteriores se ha igualado a uno. Por tanto los valores de intensidad mostrados anteriormente no corresponden a la intensidad realmente, si no que son proporcionales a ésta.

A la vista de estos resultados, se observa que para una altura de columna de aproximadamente 700nm se obtiene un lóbulo principal nulo, es decir, una m de 11.19. En este sentido conviene fijarse para qué altura de columnas vienen dados los ceros de los distintos picos, por eso a continuación se muestra una grafica de la función de Bessel al cuadrado en relación a la altura de columnas de la red de difracción. El propósito de esta grafica es comprobar para que altura de las columnas de la red se anulan los distintos factores de la función de Bessel:



**Figura 4. 6 Función de Bessel de primera especie al cuadrado frente a la altura de las columnas de una red de difracción en nanómetros**

A modo de resumen, en la siguiente tabla se muestran los valores de  $\beta = m/2$  y los valores de las alturas de las columnas de la red de difracción que hacen cero la función de Bessel, es decir, los puntos característicos de la función de Bessel en función del orden de la función, el retardo pico a pico y la altura de la columna que provoca dicho retardo.

<i>Orden de la función de Bessel, q</i>										
	<i>0</i>		<i>1</i>		<i>2</i>		<i>3</i>		<i>4</i>	
	$\beta = m/2$	$d \text{ (nm)}$	$\beta = m/2$	$d \text{ (nm)}$	$\beta = m/2$	$d \text{ (nm)}$	$\beta = m/2$	$d \text{ (nm)}$	$\beta = m/2$	$d \text{ (nm)}$
<b>1<sup>er</sup> Cero</b>	2.40	300.40	3.83	479.39	5.14	643.36	6.38	798.57	7.59	950.02
<b>2<sup>o</sup> Cero</b>	5.52	690.92	7.02	878.67	8.42	1053.91	9.76	1221.63	11.06	1384.35
<b>3<sup>er</sup> Cero</b>	8.65	1082.70	10.17	1272.95	11.62	1454.44	13.02	1629.68	14.37	1798.65
<b>4<sup>o</sup> Cero</b>	11.79	1475.72	13.32	1667.23	14.80	1852.47	16.22	2030.21	17.62	2205.45

**Tabla 4. 1** Resumen de los puntos donde se anula la función de Bessel según su retardo de fase y altura de columna

Como era de esperar, los datos de la tabla muestran como el lóbulo central se anula para una altura de columna de 690.92nm, tal y como se observa en las graficas anteriores. En el caso concreto la función de primer orden, se comprueba cómo casi se anula dos veces en el rango de datos mostrados en las gráficas de la **figura 4.6** (altura de las columnas entre 400nm y 850nm), en concreto para 479.39nm y 878.67nm. En este caso se puede ver como varia el factor entre dos ceros.

En el caso de la función de segundo orden, se observa cómo se anula para una altura de columna de aproximadamente 650nm, 643.36nm exactamente. La función de tercer orden muestra su primer cero para una altura de columna de 798.57nm, quedando los siguientes puntos donde se anula esta función alejados de los cálculos realizados en la **figura 4.6**. LA función de cuarto orden tiene su primer cero para una altura de columna de 950.02nm, una altura de columna que no se ha considerado en las graficas de la **figura 4.6** obtenidas con el matlab, pero que puede observarse en la **figura 4.7** de la función de Bessel al cuadrado frente a la altura de las columnas de la red de difracción.

La observación de la variación de la intensidad de estos factores debería ser suficiente para caracterizar la red de difracción. La inserción de materiales de distinto índice de refracción dará una variación en el desfase provocado por las columnas, pudiéndose determinar así el índice de refracción del material entre las columnas, sabiendo si ha habido reacción bioquímica de modo que aumente el índice de refracción de la muestra.

### 4.3 Simulación con OptiFDTD 8.0

A continuación se mostrarán los resultados de las simulaciones obtenidos con el paquete software OptiFDTD, en la que se ha realizado un layout de la red de difracción (**figura 4.8**), y sobre los que se hará un análisis de los resultados en campo lejano. El OptiFDTD provee una herramienta que calcula el resultado de una simulación en campo lejano, indicándole sobre que eje realizar los cálculos. La herramienta se basa en el mismo concepto explicado en este capítulo, si se desea más información sobre esta herramienta ver **Anexo I. OptiFDTD 8.0**.

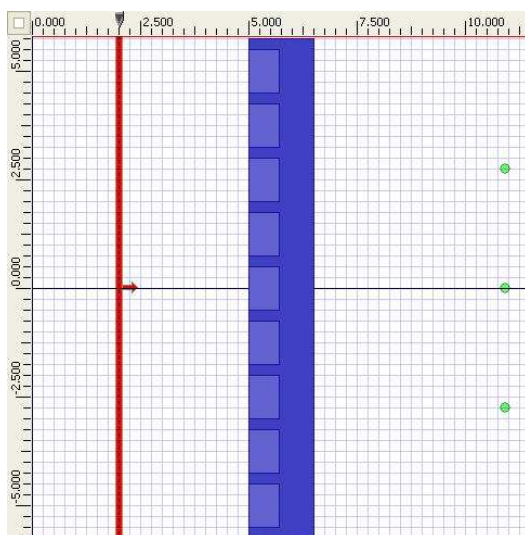


Figura 4. 7 Layout de la red de difracción

El volumen de la simulación tiene  $12\mu\text{m}$  de alto (eje x),  $6\mu\text{m}$  de profundidad (eje y) y  $11.5\mu\text{m}$  de largo (eje z). La difracción de la luz sobre la red de difracción se evaluará a una distancia  $10^6\lambda$ , o lo que es lo mismo,  $65\text{cm}$ . Esta distancia es suficiente para cumplir las condiciones de campo lejano que se exigen en el apartado **4.1.3 Difracción de Fraunhofer**.

La fuente de luz (Input Plane) se sitúa a  $2\mu\text{m}$  de la red de difracción, con una longitud de onda de  $650\text{nm}$  y un ancho de haz de  $9\times 5\mu\text{m}$ . Se opta por dar una forma gaussiano al frente de onda por intentar realizar una simulación más realista, pero el efecto de usar un frente de onda gaussiano o uno plano es insignificante, puesto que el efecto es como el de enventar una señal con una ventana rectangular o gaussiano, y nos daría unos lobulos laterales ...

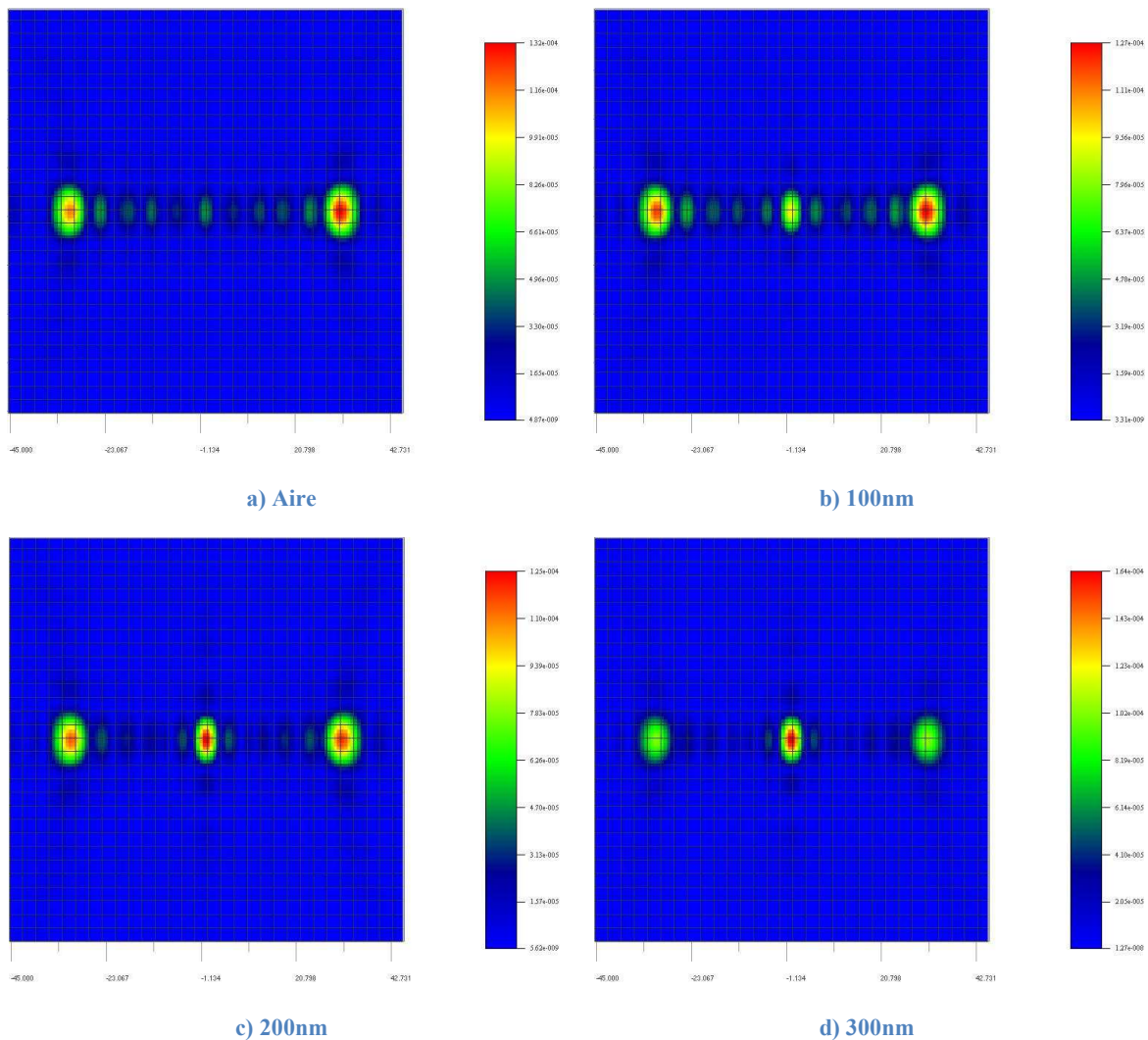
Por último, los pasos temporales y espaciales son los apropiados para no dar problemas de inestabilidad numérica. La **tabla 4.2** resume todas las características comentadas.

<b>Tamaño del volumen</b>	$12\times 6\times 11.5\mu\text{m}$
<b>Tamaño de la red</b>	$12\times 6\mu\text{m}$
<b>Longitud de onda, <math>\lambda</math></b>	$650\text{ nm}$
<b>Distancia fuente-red</b>	$2\mu\text{m}$
<b>Ancho del haz (FWHM)</b>	$9\times 5\mu\text{m}$
<b>Amplitud</b>	$3\text{ V/m}$
<b>Perfil</b>	Gaussiano
<b>Paso temporal</b>	$1.51023113967667\cdot 10^{-16}\text{ seg}$
<b>Grid Mesh</b>	$\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.09\mu\text{m}$
<b>Campo lejano</b>	$z = 10^6\lambda$

Tabla 4. 2 Resumen de las características de la simulación

## 4.3.1 Resultados de la Simulación.

Las siguientes imágenes muestran el resultado obtenido para la red de difracción cuyas columnas son de 700nm de altura. El espacio entre las columnas se ha ido llenando de un material de distinto índice de refracción en capas de 100nm, para ver como varia la intensidad en campo lejano y comprobar si los resultados obtenidos son los esperados. El material tiene un índice de refracción de 1.45, aproximadamente el del material biológico que interesa detectar.





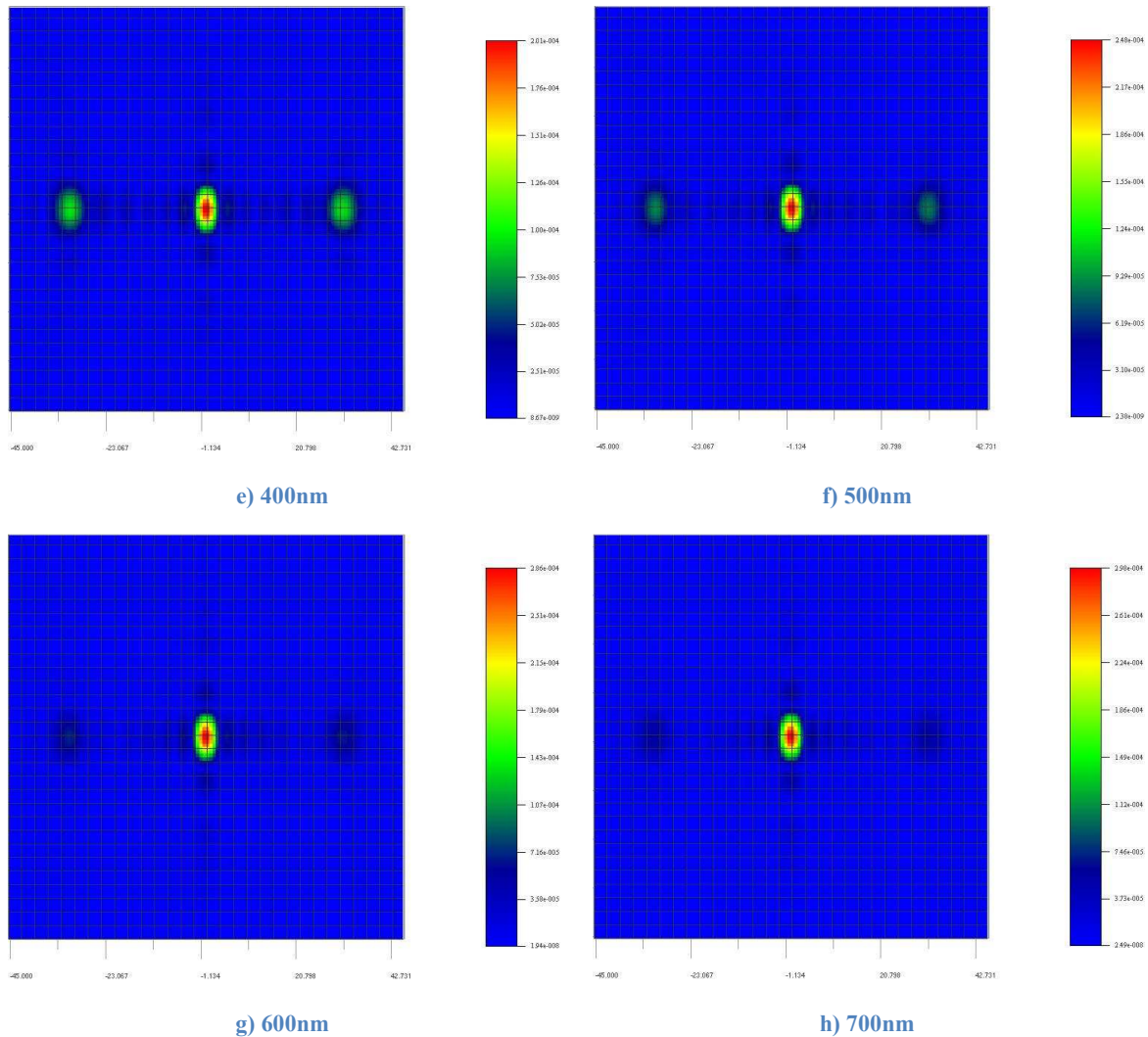


Figura 4. 8 Difracción en campo lejano, resultados con distinto grosor de material biológico

Los resultados de la simulación mostrados en la **figura 4.8** no son los que eran de esperar, puesto que no se aprecia más que un pico a ambos lados del factor de orden cero, en vez de tener varios factores como se ha mostrado en el apartado anterior. Los ejes de las gráficas de la figura 4.9 están entre  $-45^\circ$  y  $45^\circ$  tanto en el eje x como en el eje y.

El comportamiento general de los dos factores que aparecen en las gráficas sí que responden adecuadamente a lo que era de esperar, es decir, cuando en la red no hay material alguno o cuando las capas de ese material son pocas, el factor de orden cero es muy pequeño, casi nulo cuando en el espacio entre las columnas solo hay aire, tal y como puede verse en la **figura 4.6-g**. A medida que va aumentando la cantidad de material entre las columnas el factor de orden cero va aumentando en intensidad puesto que predomina la transmisión sobre la difracción, es decir, la red de difracción no provoca grandes desfases puesto que el índice de refracción es más uniforme en todo el dispositivo.

En cuanto a las amplitudes mostradas, la amplitud total (la suma de todos los factores) se mantiene constante a lo largo de todas las gráficas de la **figura 4.8**, y se observa como la amplitud de los picos de los laterales se concentra en el pico central a medida que se va

aumentando el grosor de las capas de material en el espacio entre columnas de la red de difracción.

A continuación en la **figura 4.9** se muestra gráficamente la variación de la amplitud e intensidad en función del tamaño de la capa de material biológico de los resultados obtenidos mediante el simulador, aunque no fiables, muestran una tendencia esperada.

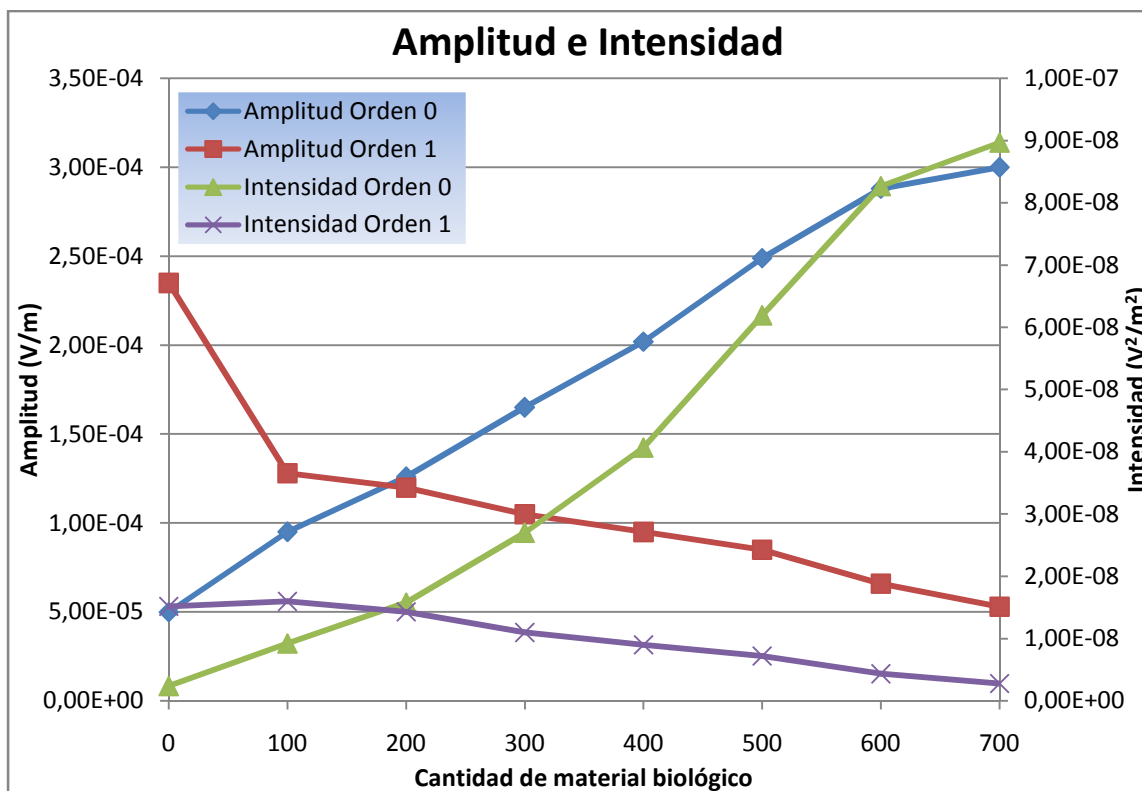


Figura 4. 9 Resultados de amplitud e intensidad en función de la capa de material ( $n = 1.45$ ) de la red de difracción, obtenidos con el OptiFDTD

A modo de resumen, en la **tabla 4.3** se muestran los resultados obtenidos con el OptiFDTD en cuanto a amplitud e intensidad de la luz. La tendencia de los datos es la esperada, puesto que la intensidad del factor de orden cero va aumentando conforme se le va añadiendo grosor a la capa de material biológico, mientras que los factores de orden uno va disminuyendo. La disminución de la intensidad de la luz para el factor de orden uno es muy pequeña, pero sigue una tendencia bastante lineal, mientras que el aumento de la intensidad del factor de orden cero muestra una tendencia positiva mayor, y lineal hasta llegar a la última capa de material.



<b>Grosor capa material (nm)</b>	<b>Amplitud (V/m)</b>		<b>Intensidad (V<sup>2</sup>/m<sup>2</sup>)</b>	
	<b>Orden 0</b>	<b>Orden 1</b>	<b>Orden 0</b>	<b>Orden 1</b>
<b>0</b>	5.00E-05	2.35E-04	2.40E-09	1.52E-08
<b>100</b>	9.50E-05	1.28E-04	9.24E-09	1.60E-08
<b>200</b>	1.26E-04	1.20E-04	1.58E-08	1.43E-08
<b>300</b>	1.65E-04	1.05E-04	2.70E-08	1.10E-08
<b>400</b>	2.02E-04	9.50E-05	4.07E-08	9.04E-09
<b>500</b>	2.49E-04	8.50E-05	6.19E-08	7.23E-09
<b>600</b>	2.88E-04	6.60E-05	8.27E-08	4.37E-09
<b>700</b>	3.00E-04	5.30E-05	8.97E-08	2.82E-09

**Tabla 4. 3 Resultados de la simulación de la red de difracción**

A la vista de los resultados obtenidos con el simulador, se podría caracterizar la variación de la intensidad o la amplitud en función del índice de refracción del material para, por ejemplo, una capa de 100nm de grosor, puesto que en la práctica no se van a tener grosores demasiado grandes. De todas formas, como los resultados no parecen del todo correctos y solo muestran factores de orden cero y de orden uno, no se procederá a realizar este paso.

Bibliografía del Capítulo 4. Difracción de Fraunhofer:

[4.1] “OptiFDTD 8.0. Technical Background and Tutorials”, Optiwave.

[4.2] “Introduction to Fourier Optics”, Joseph W. Goodman

# [Anexo I. OptiFDTD 8.0]



En este anexo se ha desarrollado una breve descripción del paquete software **OptiFDTD 8.0**, se introduce la manera de generar perfiles tridimensionales con distintos materiales, así como la manera de usarlos sobre los distintos elementos ópticos que se pueden introducir en el diseño de un layout. También se muestran los pasos necesarios para lanzar una simulación adecuadamente, así como los diferentes modos de tratar los datos de las simulaciones.

## I.1 Método FDTD.

El método FDTD se basa en una solución numérica directa de las ecuaciones de onda de Maxwell dependientes del tiempo. La primera aproximación a este método se hace para simulaciones en 2D, donde los dispositivos se sitúan en el plano XZ. Posteriormente se desarrollan las ecuaciones para simulaciones en 3D, donde el dominio es un volumen en el que se consideran todas las dimensiones espaciales [I.1].

### I.1.1 Ecuaciones FDTD 2D.

Como se ha mencionado, en el caso bidimensional el dispositivo fotónico se sitúa en el plano XZ, y la propagación se realiza a lo largo del eje z. La dirección y se asume infinita, por lo que se eliminan las derivadas  $\partial/\partial y$  de las ecuaciones de Maxwell y se dividen en dos (TE y TM) sistemas de ecuaciones independientes tal y como puede verse en la **tabla I.1**

TE	TM
$\mu_0 \frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{\partial E_y}{\partial z}$	$\mu_0 \frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z}$
$\mu_0 \frac{\partial H_z}{\partial t} = -\frac{\partial E_y}{\partial x}$	$\epsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma E_x = -\frac{\partial H_y}{\partial z}$
$\epsilon \frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x}$	$\mu_0 \frac{\partial E_z}{\partial t} + \sigma E_z = \frac{\partial H_y}{\partial x}$

Tabla I. 1 Ecuaciones de Maxwell par simulaciones 2D

En la **tabla I.1** se ve que el caso TE son las componentes  $H_x$ ,  $E_y$  y  $H_z$  las que se propagan a lo largo del eje z y en el caso TM son las componentes  $H_y$ ,  $E_x$  y  $E_z$ . Ecuaciones en un medio sin pérdidas, donde  $\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r$  es la permitividad dieléctrica y  $\mu_0$  es la permeabilidad magnética en el vacío. El índice de refracción se calcula como  $n = \sqrt{\epsilon_r}$ .

En el algoritmo FDTD cada campo se representa por un vector bidimensional (TE-  $H_x(i, k)$ ,  $E_y(i, k)$  y  $H_z(i, k)$ ) que se corresponde con la malla en la que se divide el plano XZ para los cálculos numéricos. Los índices i y k son el número de pasos espaciales en las direcciones X y Z, respectivamente. En la **figura I.1** pueden verse las localizaciones de los campos TE (a) y TM (b) en el dominio computacional.

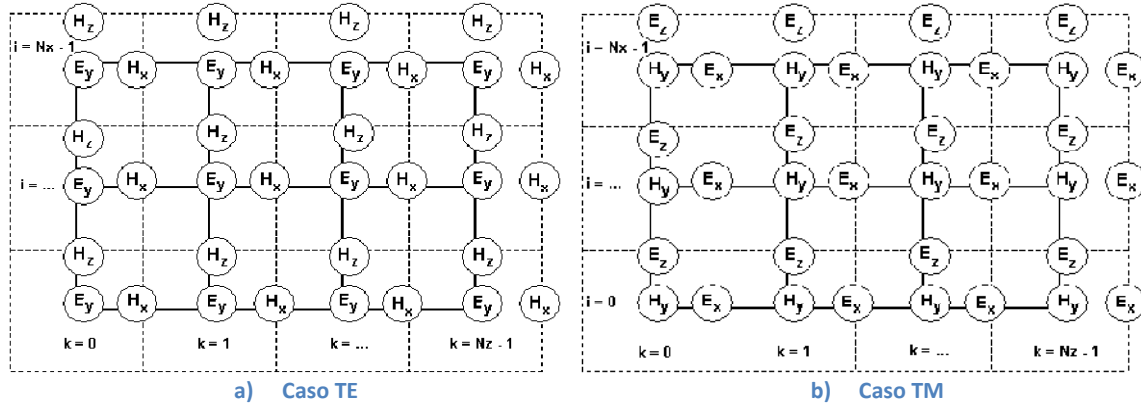


Figura I. 1

Para el caso TE, por ejemplo, la plantilla de la **figura I.1-a** puede explicarse como sigue. Las localizaciones del campo  $E_y$  coinciden con los nodos de la malla, en la figura la línea sólida representa el dominio del layout en el programa, mientras que las líneas discontinuas representan el dominio FDTD, levemente mayor que el anterior dominio para realizar los cálculos correctamente, teniendo en cuenta los límites de la malla. Como se observa, el campo  $E_y$  se localiza en el centro de las celdas de la malla FDTD, y los campos  $H_x$  y  $H_z$  se asocian con los bordes de dichas celdas. Las localizaciones del campo eléctrico se asocian con índices enteros de  $i$  y  $k$ , mientras que el campo  $H_x$  se asocia con un índice  $i$  entero y un índice  $(k + 0.5)$  y el campo  $H_z$  con un índice  $(i + 0.5)$  y un índice  $k$  entero.

- **Discretización numérica.**

Para el caso TE, la discretización numérica se hace como sigue, teniendo en cuenta los pasos temporales y espaciales que corresponden a la simulación:

$$\frac{E_y^n(i,k) - E_y^{n-1}(i,k)}{\Delta t} = + \frac{1}{\varepsilon} \frac{H_x^{n-0.5}(i,k+0.5) - H_x^{n-0.5}(i,k-0.5)}{\Delta z} - \frac{1}{\varepsilon} \frac{H_z^{n-0.5}(i+0.5,k) - H_z^{n-0.5}(i-0.5,k)}{\Delta x}$$

Despejando el campo  $E_y$ :

$$E_y^n(i,k) = E_y^{n-1}(i,k) + \frac{\Delta t}{\varepsilon} \frac{H_x^{n-0.5}(i,k+0.5) - H_x^{n-0.5}(i,k-0.5)}{\Delta z} - \frac{\Delta t}{\varepsilon} \frac{H_z^{n-0.5}(i+0.5,k) - H_z^{n-0.5}(i-0.5,k)}{\Delta x}$$

Los otros campos se calculan de la misma forma:

$$H_x^{n+0.5}(i,k+0.5) = H_x^{n-0.5}(i,k+0.5) + \frac{\Delta t}{\mu_0 \Delta z} [E_y^n(i,k+1) - E_y^n(i,k)]$$

$$H_z^{n+0.5}(i+0.5,k) = H_z^{n-0.5}(i+0.5,k) - \frac{\Delta t}{\mu_0 \Delta x} [E_y^n(i+1,k) - E_y^n(i,k)]$$

El superíndice  $n$  hace referencia al paso temporal, mientras que los índices  $i$  y  $k$  hacen referencia a los pasos espaciales de longitud  $\Delta x$  y  $\Delta z$ . Para mantener los resultados tan precisos como sea posible, el tamaño de malla suele acotarse a que por lo menos haya diez pasos por longitud de onda. Esto significa que como mínimo los pasos espaciales deben tener una longitud de  $1/10\lambda$  de la longitud de onda más corta empleada en la simulación.

La ecuación sugerida para el cumplimiento del paso espacial tiene en cuenta los materiales empleados en la simulación:

$$\text{minimum}(\Delta x, \Delta z) \leq \frac{\lambda_{\min}}{10n_{\max}}$$

Donde  $n_{\max}$  es el valor máximo del índice de refracción en el dominio de la simulación.

Una vez determinado el tamaño de celda, el tamaño máximo para el paso temporal debe cumplir la condición de Courant-Friedrichs-Levy:

$$\Delta t \leq \frac{1}{v \sqrt{\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta z)^2}}}$$

Donde  $v$  es la velocidad de la luz en el medio.

### I.1.2 Ecuaciones FDTD 3D.

En el caso 3D, el dominio de simulación es un volumen donde los pasos espaciales son  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  y  $\Delta z$  en los ejes x, y y z respectivamente. Cada componente de campo se representa por un vector tridimensional(  $E_x(i, j, k)$ ,  $E_y(i, j, k)$ ,  $E_z(i, j, k)$ ,  $H_x(i, j, k)$ ,  $H_y(i, j, k)$  y  $H_z(i, j, k)$ ). Las componentes de campo se distribuyen a lo largo de la celda básica de la forma que muestra la **figura I.2**.

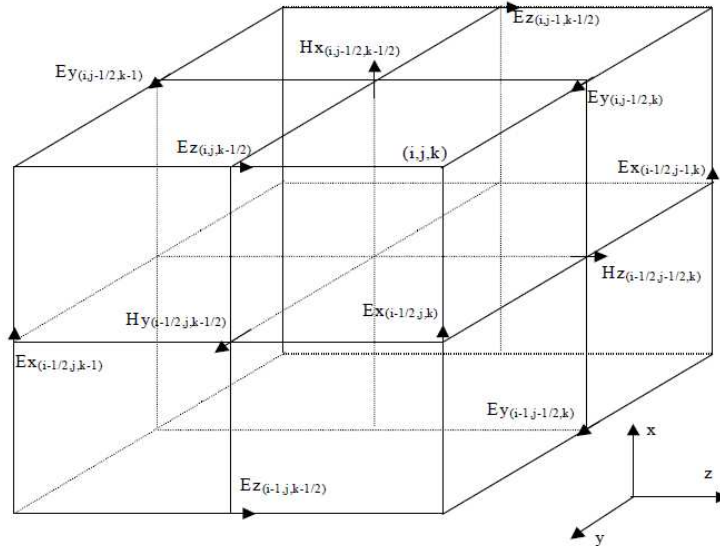


Figura I. 2 Volumen básico de la computación de las simulaciones

Los cálculos numéricos sobre las ecuaciones de Maxwell se aplican sobre el volumen anterior [I.1] del mismo modo que se ha hecho sobre el área XZ en el caso 2D, sólo que teniendo en cuenta que el eje y no es infinito. Ahora simplemente hay que asegurar la estabilidad del algoritmo y la precisión cumpliendo:

$$\text{minimum}(\Delta x, \Delta y, \Delta z) \leq \frac{\lambda_{\min}}{10n_{\max}}$$

Y en este caso la condición CFL es:

$$\Delta t \leq \frac{1}{v \sqrt{\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2} + \frac{1}{(\Delta z)^2}}}$$

## I.2 OptiFDTD Tools.

A continuación se dará un repaso a las herramientas disponibles en el paquete software OptiFDTD para crear una estructura, simular el campo electromagnético y recolectar los resultados obtenidos. Estas herramientas son: *OptiFDTD Designer*, *OptiFDTD Simulator* y *OptiFDTD Analyzer*. Dentro del Designer existe una herramienta llamada *Profile Designer*, que como se verá más adelante sirve para generar perfiles de materiales para guías o fibras ópticas.

### I.2.1 OptiFDTD Designer.

El *OptiFDTD Designer* es la herramienta con la que se crean las estructuras a simular, en las que se designan los materiales, sus propiedades, el tamaño y la forma deseadas. A la hora de crear un proyecto nuevo (**figura I.3-a**), lo primero que hay que hacer es asignar un perfil por defecto a las guías de onda. Para esto se deben elegir los materiales deseados desde la librería de materiales que trae el propio OptiFDTD o crear manualmente un material nuevo con las características deseadas. Esta parte se hace con la herramienta Profile Designer, **figura I.3-b**:

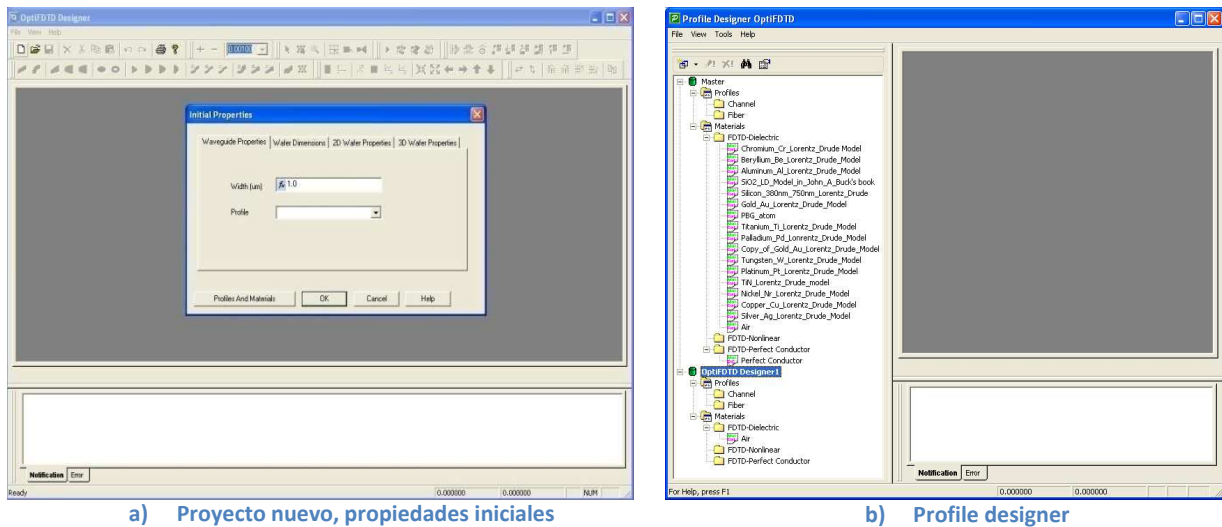


Figura I. 3 Inicio de proyecto nuevo, primeros pasos

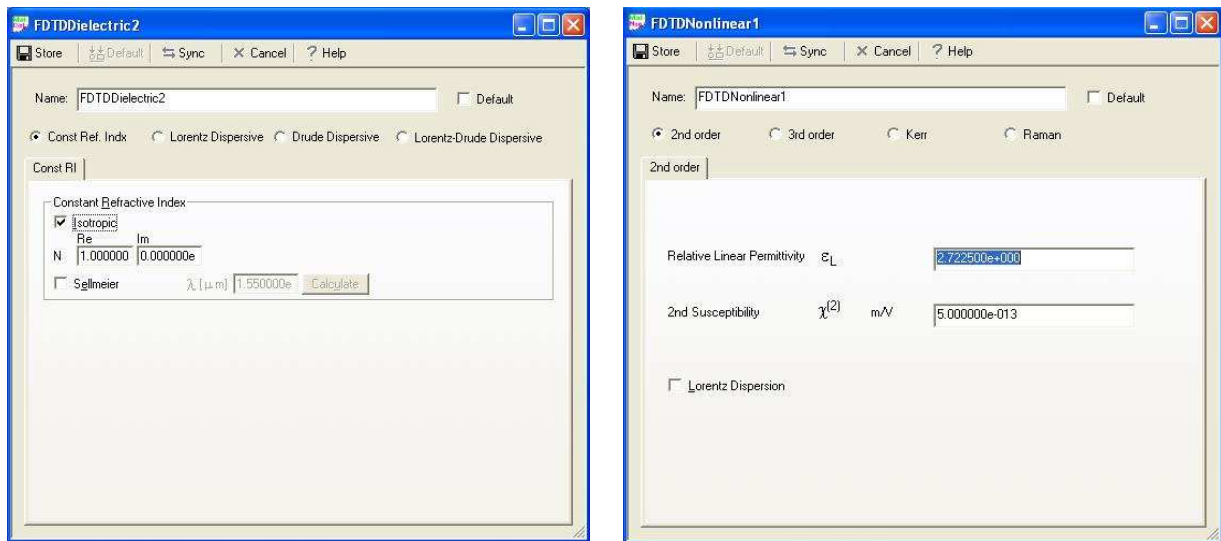
Antes de continuar con las opciones que hay en la herramienta OptiFDTD Designer, conviene mostrar el manejo de la herramienta que permite modificar los materiales y los perfiles de los elementos sobre los que se va a llevar a cabo la simulación.



## • Profile Designer.

El Profile Designer es la herramienta específica para crear materiales manualmente y generar perfiles con distintos materiales para utilizarlos en guías o fibras, por ejemplo. El propio OptiFDTD trae consigo una librería de materiales predefinidos, generalmente del modelo de Lorentz-Drude. Crear un material nuevo con las características deseadas es muy fácil, basta con hacer clic con el botón derecho en la subcarpeta de materiales sobre los materiales *FDTD Dielectric* o *FDTD Non linear* y seleccionar New. Los materiales que se usan en un proyecto deben estar en la librería correspondiente a ese proyecto, por lo que si se quiere utilizar un material predefinido del OptiFDTD lo que hay que hacer es arrastrarlo desde la librería raíz hasta la librería del proyecto en el que se desea utilizar.

Los materiales nuevos pueden editarse como se quiera, y pueden utilizarse los modelos de Lorentz, de Drude y de Lorentz-Drude en el caso de los dieléctricos (**figura I.4-a**). En el caso de los materiales no lineales se tiene la opción de definir las no-linealidades de segundo y tercer orden, el efecto Kerr y el efecto Raman (**figura I.4-b**). Existe un tercer tipo de material, el de conductor perfecto, este no se puede editar ni crear nuevo, pero el OptiFDTD trae un modelo en su librería que si se desea utilizar hay que arrastrar hasta la librería del proyecto en el que se quiera utilizar. Para más información sobre estos modelos ver **Anexo IV. Condiciones de Contorno y Modelos de Materiales**.



a) Material Dieléctrico

b) Material No-Lineal

Figura I. 4 Materiales nuevos generados manualmente.

La creación de perfiles se hace del mismo modo, haciendo clic con el botón derecho en la subcarpeta *profiles*, tanto en *Channel* (para guías de onda) como en *Fiber* (para fibra óptica) y elegir *New*. La diferencia entre crear un canal/perfil o un perfil de fibra óptica en 2D o en 3D es enorme. En dos dimensiones no se puede elegir más que un material para la guía o fibra, y será utilizado en simulaciones 2D, mientras que en 3D se crea un perfil poniendo capas de distinto grosor y anchura de distintos materiales para simulaciones 3D. En la **figura I.5** pueden verse las ventanas donde se especifican los perfiles, tanto de guías de onda y fibras.



Figura 1. 5 Creación de perfiles

Para crear un perfil nuevo de una guía, simplemente hay que introducir capas distintas que se irán apilando una sobre otra a lo largo del eje y (altura), es decir, que la primera capa introducida estará en un nivel inferior que la segunda, y la segunda en un nivel inferior que la tercera, etc. Las capas se pueden reordenar con los botones *Move up* y *Move down*.

Para la creación del perfil de una guía debe cambiarse el nombre de cada capa, meter su anchura y grosor y pulsar el botón *add*. El grosor (*thickness*) se mantendrá en la guía que generemos en el layout, mientras que lo que es la anchura dependerá de la anchura de la guía cuando se cree ésta. **Se mantendrá la proporción entre capas**, y se ajustará la anchura de la capa más ancha con la anchura de la guía. Es decir, si se crea un perfil con una capa de una anchura de  $1\mu\text{m}$  y otra de una anchura de  $0.5\mu\text{m}$  la proporción entre ellas se mantendrá, por lo que si creamos una guía con una anchura de  $1\mu\text{m}$  se mantendrá el perfil creado tal cual, mientras que si modificamos la anchura de la guía a  $2\mu\text{m}$ , el perfil de la guía se ajustará a  $2\mu\text{m}$  la capa más ancha y a  $1\mu\text{m}$  la capa más estrecha, manteniendo la proporción entre capas del perfil creado. Esto se explicará más adelante con un ejemplo.

Para la creación de un perfil de una fibra óptica deben crearse capas del mismo modo que antes, cambiando el nombre de cada una y pulsando el botón *add*. A cada capa hay que asignarle el tamaño del radio en el eje x y en el eje y. En este caso también se mantendrá la proporción con el tamaño de la fibra creada en el layout.

A continuación se muestra un ejemplo [I.1] de los datos metidos y los perfiles generados.

Ejemplo. Creación de un perfil de una guía y de una fibra.

En este ejemplo se muestran los datos introducidos para la creación de dos perfiles, uno de una guía y otro de una fibra. Antes de meter estos datos es necesario crear los materiales deseados, o copiarlos de la librería del OptiFDTD al proyecto. A continuación se muestran las características de las capas de cada perfil:

Guía (Nombre: ChannelPro1)	Fibra (Nombre: FiberPro1)
Capa 1: <ul style="list-style-type: none"><li>- Nombre: Layer1</li><li>- Width: 1.5</li><li>- Thickness: 1.0</li><li>- Offset: 0</li><li>- Material: n = 3.0</li></ul>	Capa 1: <ul style="list-style-type: none"><li>- Nombre: Core</li><li>- Rx: 0.5</li><li>- Ry: 0.5</li><li>- Material: n = 3.0</li></ul>
Capa 2: <ul style="list-style-type: none"><li>- Nombre: Layer2</li><li>- Width: 1.0</li><li>- Thickness: 0.5</li><li>- Offset: 0</li><li>- Material: n = 2.5</li></ul>	Capa 2: <ul style="list-style-type: none"><li>- Nombre: Cladding</li><li>- Rx: 1.0</li><li>- Ry: 1.0</li><li>- Material: n = 2.5</li></ul>

Tabla I. 2 Propiedades de los perfiles del ejemplo

Finalmente, después de asignar el tamaño y material a usar en el layout se introduce una guía onda y una fibra óptica en la posición deseada, dando como resultado la **figura I.6**.

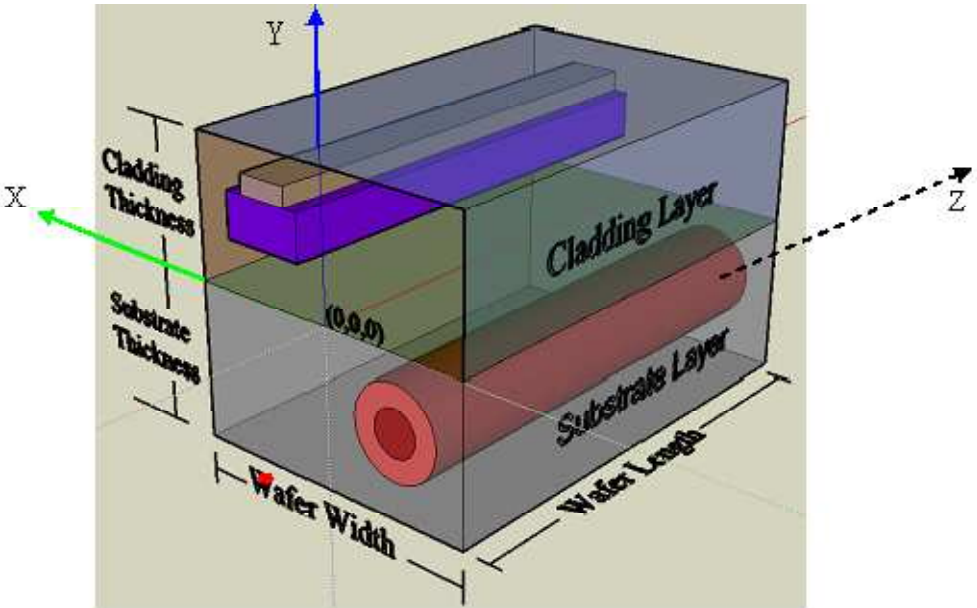


Figura I. 6 Perfiles generados.

Dejando de lado el *Profile Designer*, para continuar en la creación de un proyecto nuevo, hay que seleccionar un perfil para una guía por defecto, seleccionar el tamaño de la malla en micrómetros (plano XZ), y seleccionar el material de la malla en 2D, o en 3D. Si se desea crear un proyecto tridimensional, hay que asignar un material para lo que se llama *Cladding* ( $y > 0$ ) y su grosor, y para el sustrato (*Substrate*,  $y < 0$ ) y su grosor también. Esto se hace después de haber creado los perfiles deseados, en la ventana de *Initial Properties*, **figura I.3-a**.

Una vez se tienen esos puntos concretados aparece una cuadrícula que representa la vista desde arriba del plano XZ del tamaño indicado anteriormente. En el menú *Draw*, figura **I.7**, se encuentran todos los tipos de elementos que se pueden dibujar en el layout, más adelante se hará una breve descripción de cada uno de ellos.

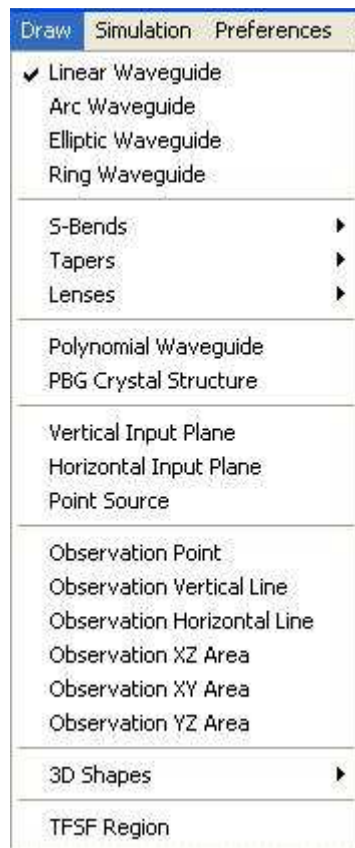


Figura I. 7 Menu Draw

### I.2.1.1 Variables y funciones (Variables and Functions).

Antes de comenzar con los elementos del menú *Waveguides* y el resto de menús se hará una breve descripción la ventana de edición y modificación de variables y funciones, **figura I.8**.

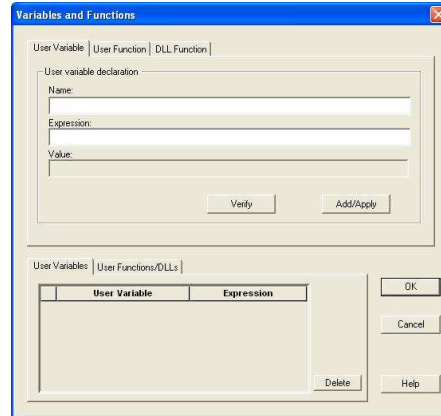


Figura I. 8 Ventana de edición de variables y funciones, pestaña User Variable

La ventana cuenta con tres pestañas en la parte superior para editar o crear funciones o variables individualmente, y otras dos pestañas en la parte inferior que tienen una lista de variables o funciones ya definidas. El acceso se hace desde el menú *Simulation > Edit Parameters*, o pulsando el botón  $f_x$  que aparece en las ventanas de propiedades de las guías.

#### a. User Variable

Una variable de este tipo tiene un nombre y una expresión que se evalúa a un valor numérico (**figura I.8**). No hace falta insertar una función matemática en la expresión si lo que se desea declarar es una constante, con insertar la constante es suficiente.

Con el botón *Verify* se comprueba que no haya una variable con el mismo nombre, y con el botón *Add/Apply* se declara la variable si es nueva, o se modifica si lo que se quería era modificar el valor de la variable.

#### b. User Function

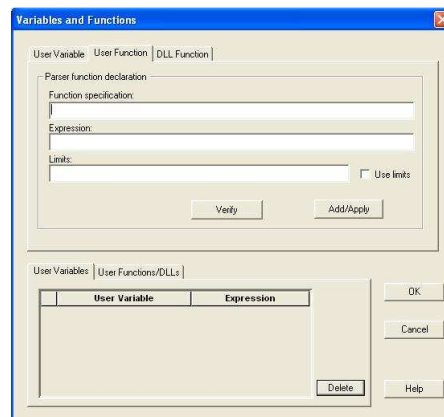


Figura I. 9 Pestaña User Function

Se puede declarar una función con un nombre y varios argumentos y unos límites si se desea. En el momento de la definición de la función, los argumentos no tienen valor numérico.

Se pueden usar expresiones matemáticas y fórmulas para declarar la función deseada, que no dará un valor numérico hasta que se definan los argumentos de la misma.

### c. DLL Function

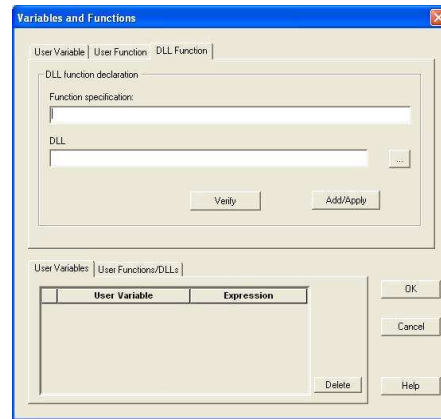


Figura I. 10 Pestaña DLL Function

Se puede asignar una función definida en una DLL (Dynamic Link Library) haciendo coincidir el número de argumentos con los de la función en el DLL. La especificación de la función debe coincidir con la función provista por el DLL para poder usarla.

## I.2.1.2 Waveguides.



Figura I. 11 Menu Waveguides

El menú *Waveguides*, mostrado en la **figura I.11**, permite seleccionar el tipo de elemento o estructura que se va a introducir en el layout. Por lo general, para dibujar un elemento, por ejemplo una guía onda lineal, simplemente hay que seleccionarlo en el menú *Waveguides* y dibujarlo en el layout arrastrándolo con el ratón. Para situar la guía en la posición adecuada y con las características deseadas simplemente hay que hacer doble clic sobre ella, abriendo así una ventana de propiedades de la guía o el elemento que sea. A continuación se hará una breve descripción de todas las opciones que se pueden incluir.

- **Linear Waveguide.**

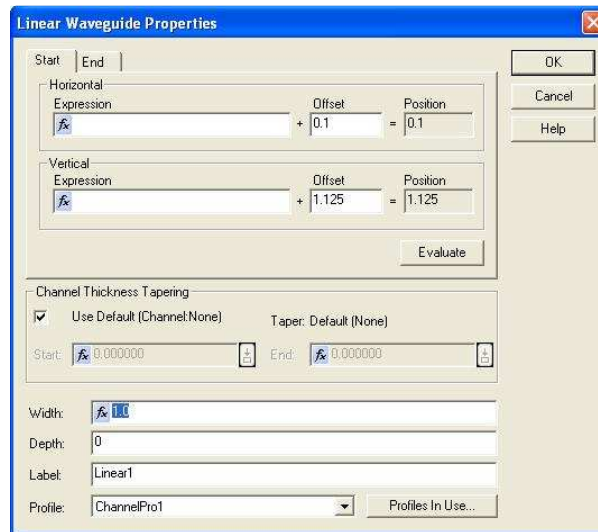


Figura I. 12 Linear Waveguide Properties

a. Pestañas Start/End.

En estas pestañas se introduce la posición (vertical y horizontal del plano XZ) inicial y final de la guía. Se puede introducir una expresión matemática pinchando sobre el botón  $f_x$ , pero si la posición no depende de ninguna variable se suele usar el *Offset*. Se pueden combinar y usar una expresión y un offset.

b. Channel Thickness Tapering.

Se puede introducir un taper vertical (eje y) que estreche la guía creada. Se puede seleccionar un taper lineal, en el que los puntos Start-End que aparecen indican la altura de la guía al principio y al final de la misma, creando un taper lineal en base a esos dos datos.

c. Width

Indica la anchura de la guía en el eje x. El grosor de la guía en 3D, eje y, se indica en el *Profile Designer*.

d. Depth

Indica la posición en el eje y. Sólo válido en 3D.

e. Label

Nombre asignado a la guía, se puede poner automáticamente o asignarle un nombre manualmente.

f. Profile

Se selecciona un perfil creado con el *Profile Designer*. Se puede seleccionar desplegando una lista de los perfiles ya creados, o crear uno nuevo abriendo el *Profile Designer* con el botón en el que pone *Profiles In Use...*

- **Arc Waveguide.**

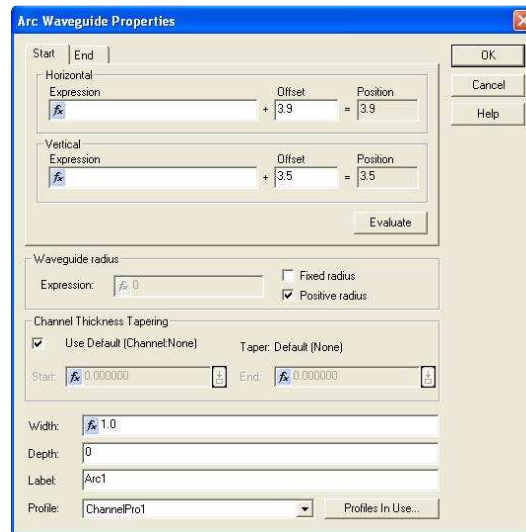


Figura I. 13 Arc Waveguide Properties

a. Pestañas Start/End.

En estas pestañas se introduce la posición (vertical y horizontal del plano XZ) inicial y final de la guía. Se puede introducir una expresión matemática pinchando sobre el botón  $f_x$ , pero si la posición no depende de ninguna variable se suele usar el *Offset*. Se pueden combinar y usar una expresión y un *offset*.

b. Waveguide Radius.

Se puede acomodar la guía en arco mediante el radio de la misma, y también hacer que el radio sea positivo o negativo para que la curva obtenga la posición deseada.

c. Channel Thickness Tapering

Se puede introducir un taper vertical (eje y) que estreche la guía creada. Se puede seleccionar un taper lineal, en el que los puntos Start-End que aparecen indican la altura de la guía al principio y al final de la misma, creando un taper lineal en base a esos dos datos.

d. Width

Indica la anchura de la guía en el eje x. El grosor de la guía en 3D, eje y, se indica en el *Profile Designer*.

e. Depth

Indica la posición en el eje y. Sólo válido en 3D.

f. Label

Nombre asignado a la guía, se puede poner automáticamente o asignarle un nombre manualmente.

g. Profile

Se selecciona un perfil creado con el *Profile Designer*. Se puede seleccionar desplegando una lista de los perfiles ya creados, o crear uno nuevo abriendo el *Profile Designer* con el botón en el que pone *Profiles In Use...*



- **Elliptic Waveguide.**

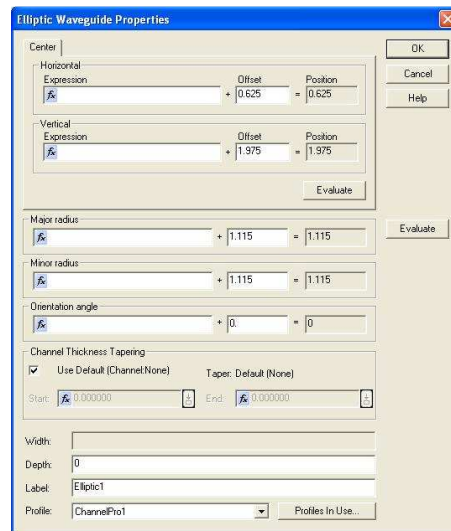


Figura I. 14 Elliptic Waveguide Properties

a. Pestaña Center.

En estas pestañas se introduce la posición (vertical y horizontal del plano XZ) central de la guía. Se puede introducir una expresión matemática pinchando sobre el botón  $f_x$ , pero si la posición no depende de ninguna variable se suele usar el *Offset*. Se pueden combinar y usar una expresión y un offset.

b. Major/Minor Radius.

Permite la creación de una guía elíptica introduciendo el radio mayor y menor de la misma.

c. Orientation Angle.

Con esta opción se puede orientar la guía con el ángulo que se desee si es necesario.

d. Channel Thickness Tapering

Se puede introducir un taper vertical (eje y) que estreche la guía creada. Se puede seleccionar un taper lineal, en el que los puntos Start-End que aparecen indican la altura de la guía al principio y al final de la misma, creando un taper lineal en base a esos dos datos.

e. Depth

Indica la posición en el eje y. Sólo válido en 3D.

f. Label

Nombre asignado a la guía, se puede poner automáticamente o asignarle un nombre manualmente.

g. Profile

Se selecciona un perfil creado con el *Profile Designer*. Se puede seleccionar desplegando una lista de los perfiles ya creados, o crear uno nuevo abriendo el *Profile Designer* con el botón en el que pone *Profiles In Use...*

- **Ring Waveguide.**

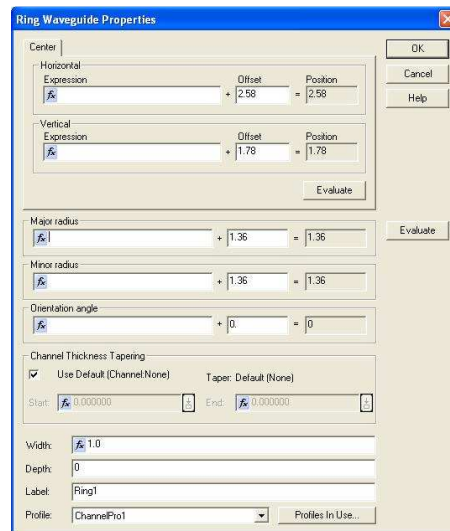


Figura I. 15 Ring Waveguide Properties

a. Pestaña Center.

En estas pestañas se introduce la posición (vertical y horizontal del plano XZ) central de la guía. Se puede introducir una expresión matemática pinchando sobre el botón  $f_x$ , pero si la posición no depende de ninguna variable se suele usar el *Offset*. Se pueden combinar y usar una expresión y un *offset*.

b. Major/Minor Radius.

Permite la creación de una guía anular introduciendo el radio mayor y menor de la misma como en el caso de la elipse, no significa que se seleccione el radio exterior e interior del anillo, si no que se creara un anillo con forma elipsoidal.

c. Orientation Angle.

Con esta opción se puede orientar la guía con el ángulo que se desee si es necesario.

d. Channel Thickness Tapering

Se puede introducir un taper vertical (eje y) que estreche la guía creada. Se puede seleccionar un taper lineal, en el que los puntos Start-End que aparecen indican la altura de la guía al principio y al final de la misma, creando un taper lineal en base a esos dos datos.

e. Width

Indica la anchura de la guía, haciendo el agujero del anillo mayor o menor según el caso. El grosor de la guía en 3D, eje y, se indica en el *Profile Designer*.

f. Depth

Indica la posición en el eje y. Sólo válido en 3D.

g. Label

Nombre asignado a la guía, se puede poner automáticamente o asignarle un nombre manualmente.

h. Profile

Se selecciona un perfil creado con el *Profile Designer*. Se puede seleccionar desplegando una lista de los perfiles ya creados, o crear uno nuevo abriendo el *Profile Designer* con el botón en el que pone *Profiles In Use...*

- S-Bends
  - a. S-Bend Arc Waveguide

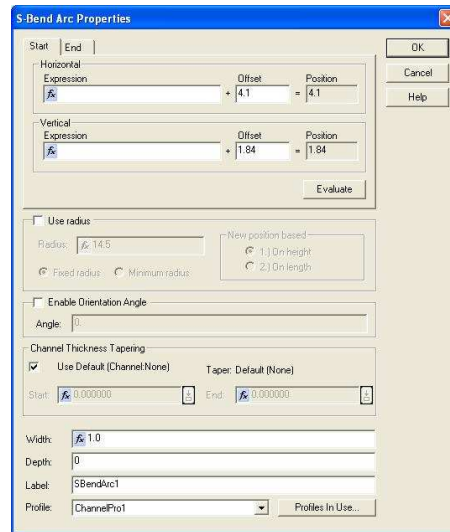


Figura I. 16 S-bend Arc Waveguide

- a. Pestañas Start/End.  
En estas pestañas se introduce la posición (vertical y horizontal del plano XZ) inicial y final de la guía. Se puede introducir una expresión matemática pinchando sobre el botón  $f_x$ , pero si la posición no depende de ninguna variable se suele usar el *Offset*. Se pueden combinar y usar una expresión y un offset.
- b. Use Radius.  
Permite la creación de una guía arqueada introduciendo el radio y la base para su aplicación.
- c. Enable Orientation Angle.  
Con esta opción se puede orientar la guía con el ángulo que se desee si es necesario.
- d. Channel Thickness Tapering  
Se puede introducir un taper vertical (eje y) que estreche la guía creada. Se puede seleccionar un taper lineal, en el que los puntos Start-End que aparecen indican la altura de la guía al principio y al final de la misma, creando un taper lineal en base a esos dos datos.
- e. Width  
Indica la anchura de la guía, haciendo el agujero del anillo mayor o menor según el caso. El grosor de la guía en 3D, eje y, se indica en el *Profile Designer*.
- f. Depth  
Indica la posición en el eje y. Sólo válido en 3D.
- g. Label  
Nombre asignado a la guía, se puede poner automáticamente o asignarle un nombre manualmente.
- h. Profile  
Se selecciona un perfil creado con el *Profile Designer*. Se puede seleccionar desplegando una lista de los perfiles ya creados, o crear uno nuevo abriendo el *Profile Designer* con el botón en el que pone *Profiles In Use...*

## b. S-Bend Sine Waveguide

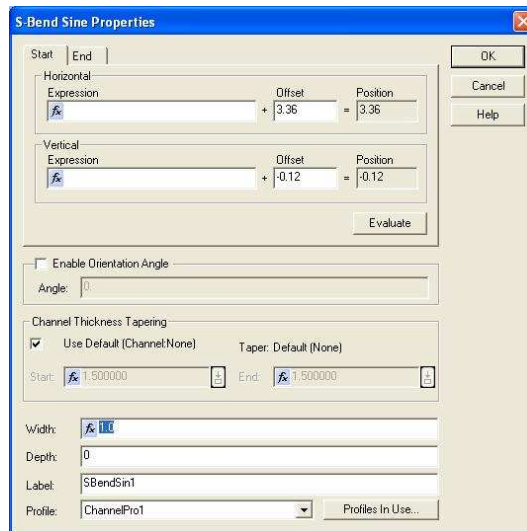


Figura I. 17 S-bend Sine Waveguide

a. Pestañas Start/End.

En estas pestañas se introduce la posición (vertical y horizontal del plano XZ) inicial y final de la guía, cuya forma seguirá una función senoidal (1/2 Periodo máximo). Se puede introducir una expresión matemática pinchando sobre el botón  $f_x$ , pero si la posición no depende de ninguna variable se suele usar el *Offset*. Se pueden combinar y usar una expresión y un offset.

b. Enable Orientation Angle.

Con esta opción se puede orientar la guía con el ángulo que se desee si es necesario.

c. Channel Thickness Tapering

Se puede introducir un taper vertical (eje y) que estreche la guía creada. Se puede seleccionar un taper lineal, en el que los puntos Start-End que aparecen indican la altura de la guía al principio y al final de la misma, creando un taper lineal en base a esos dos datos.

d. Width

Indica la anchura de la guía, haciendo el agujero del anillo mayor o menor según el caso. El grosor de la guía en 3D, eje y, se indica en el *Profile Designer*.

e. Depth

Indica la posición en el eje y. Sólo válido en 3D.

f. Label

Nombre asignado a la guía, se puede poner automáticamente o asignarle un nombre manualmente.

g. Profile

Se selecciona un perfil creado con el *Profile Designer*. Se puede seleccionar desplegando una lista de los perfiles ya creados, o crear uno nuevo abriendo el *Profile Designer* con el botón en el que pone *Profiles In Use...*

## c. S-Bend Cosine Waveguide

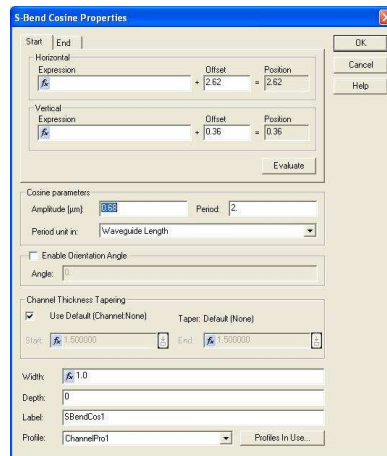


Figura I. 18 S-bemd Cosine Waveguide

a. Pestañas Start/End.

En estas pestañas se introduce la posición (vertical y horizontal del plano XZ) inicial y final de la guía, cuya forma seguirá una función cosenoidal. Se puede introducir una expresión matemática pinchando sobre el botón  $f_x$ , pero si la posición no depende de ninguna variable se suele usar el *Offset*. Se pueden combinar y usar una expresión y un offset.

b. Cosine Parameters.

Hay que editar los parámetros del coseno como se desee, la amplitud y el periodo. Se puede introducir el periodo en función de la longitud de la guía o directamente en micras.

c. Enable Orientation Angle.

Con esta opción se puede orientar la guía con el ángulo que se desee si es necesario.

d. Channel Thickness Tapering

Se puede introducir un taper vertical (eje y) que estreche la guía creada. Se puede seleccionar un taper lineal, en el que los puntos Start-End que aparecen indican la altura de la guía al principio y al final de la misma, creando un taper lineal en base a esos dos datos.

e. Width

Indica la anchura de la guía, haciendo el agujero del anillo mayor o menor según el caso. El grosor de la guía en 3D, eje y, se indica en el *Profile Designer*.

f. Depth

Indica la posición en el eje y. Sólo válido en 3D.

g. Label

Nombre asignado a la guía, se puede poner automáticamente o asignarle un nombre manualmente.

h. Profile

Se selecciona un perfil creado con el *Profile Designer*. Se puede seleccionar desplegando una lista de los perfiles ya creados, o crear uno nuevo abriendo el *Profile Designer* con el botón en el que pone *Profiles In Use...*

- **Tapers**
  - a) **Linear Taper**

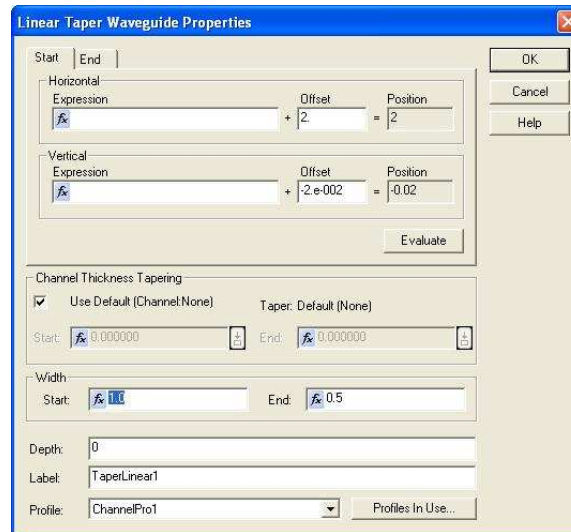


Figura I. 19 Linear Taper Waveguide Properties

a. Pestañas Start/End.

En estas pestañas se introduce la posición (vertical y horizontal del plano XZ) inicial y final de la guía. Se puede introducir una expresión matemática pinchando sobre el botón  $f_x$ , pero si la posición no depende de ninguna variable se suele usar el *Offset*. Se pueden combinar y usar una expresión y un offset.

b. Channel Thickness Tapering.

Se puede introducir un taper vertical (eje y) que estreche el taper creado. Se puede seleccionar un taper lineal, en el que los puntos Start-End que aparecen indican la altura de la guía al principio y al final de la misma, creando un taper lineal en base a esos dos datos.

c. Width

Indica la anchura de la guía en el eje x. La anchura Start indica la anchura que tiene el taper al principio de la guía, y la anchura End indica la anchura al final de la guía.

d. Depth

Indica la posición en el eje y. Sólo válido en 3D.

e. Label

Nombre asignado a la guía, se puede poner automáticamente o asignarle un nombre manualmente.

f. Profile

Se selecciona un perfil creado con el *Profile Designer*. Se puede seleccionar desplegando una lista de los perfiles ya creados, o crear uno nuevo abriendo el *Profile Designer* con el botón en el que pone *Profiles In Use...*

## b) Exponential Taper Waveguide

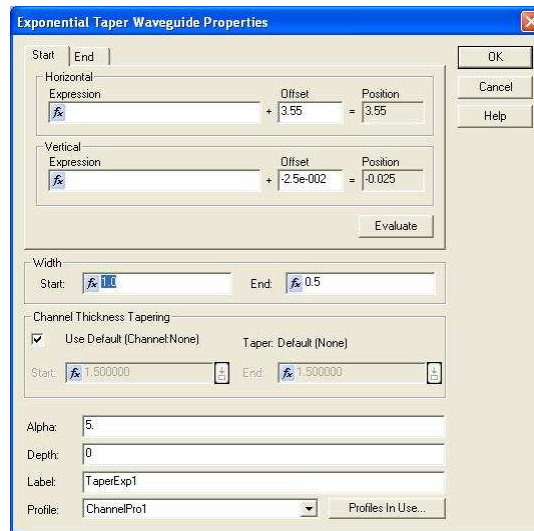


Figura I. 20 Exponential Taper Waveguide Properties

a. Pestañas Start/End.

En estas pestañas se introduce la posición (vertical y horizontal del plano XZ) inicial y final de la guía. Se puede introducir una expresión matemática pinchando sobre el botón  $f_x$ , pero si la posición no depende de ninguna variable se suele usar el *Offset*. Se pueden combinar y usar una expresión y un offset.

b. Channel Thickness Tapering.

Se puede introducir un taper vertical (eje y) que estreche el taper creado. Se puede seleccionar un taper lineal, en el que los puntos Start-End que aparecen indican la altura de la guía al principio y al final de la misma, creando un taper lineal en base a esos dos datos.

c. Width

Indica la anchura del taper en el eje x. La anchura Start indica la anchura que tiene el taper al principio de la guía, y la anchura End indica la anchura al final de la guía. El taper seguirá una función exponencial en cada uno de sus lados.

d. Depth

Indica la posición en el eje y. Sólo válido en 3D.

e. Label

Nombre asignado al taper, se puede poner automáticamente o asignarle un nombre manualmente.

f. Profile

Se selecciona un perfil creado con el *Profile Designer*. Se puede seleccionar desplegando una lista de los perfiles ya creados, o crear uno nuevo abriendo el *Profile Designer* con el botón en el que pone *Profiles In Use...*

## c) Parabolic Taper Waveguide

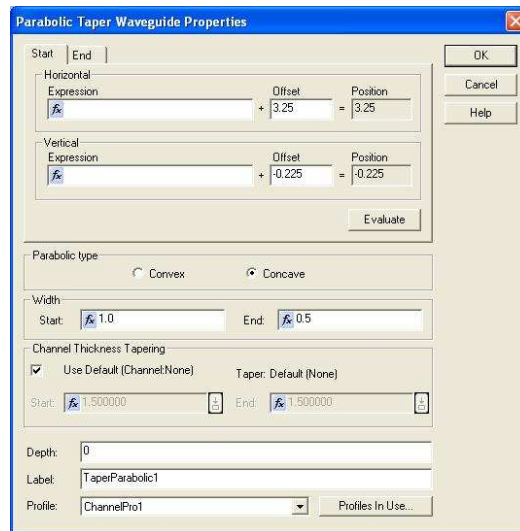


Figura I. 21 Parabolic Taper Waveguide Properties

a. Pestañas Start/End.

En estas pestañas se introduce la posición (vertical y horizontal del plano XZ) inicial y final de la guía. Se puede introducir una expresión matemática pinchando sobre el botón  $f_x$ , pero si la posición no depende de ninguna variable se suele usar el *Offset*. Se pueden combinar y usar una expresión y un *offset*.

b. Parabolic type.

Se puede elegir si el taper seguirá una función parabólica cóncava o convexa.

c. Channel Thickness Tapering.

Se puede introducir un taper vertical (eje y) que estreche el taper creado. Se puede seleccionar un taper lineal, en el que los puntos Start-End que aparecen indican la altura de la guía al principio y al final de la misma, creando un taper lineal en base a esos dos datos.

d. Width

Indica la anchura del taper en el eje x. La anchura Start indica la anchura que tiene el taper al principio, y la anchura End indica la anchura al final. El taper seguirá una función parabólica en cada uno de sus lados.

e. Depth

Indica la posición en el eje y. Sólo válido en 3D.

f. Label

Nombre asignado al taper, se puede poner automáticamente o asignarle un nombre manualmente.

g. Profile

Se selecciona un perfil creado con el *Profile Designer*. Se puede seleccionar desplegando una lista de los perfiles ya creados, o crear uno nuevo abriendo el *Profile Designer* con el botón en el que pone *Profiles In Use...*



#### d) S-Bend Arc Taper

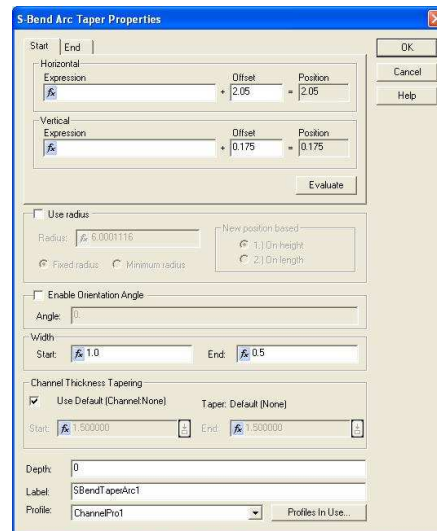


Figura I. 22 S-bend Arc Taper Properties

##### a. Pestañas Start/End.

En estas pestañas se introduce la posición (vertical y horizontal del plano XZ) inicial y final del taper. Se puede introducir una expresión matemática pinchando sobre el botón  $f_x$ , pero si la posición no depende de ninguna variable se suele usar el *Offset*. Se pueden combinar y usar una expresión y un *offset*.

##### b. Use Radius.

Permite la creación de un taper arqueado introduciendo el radio y la base para su aplicación.

##### c. Enable Orientation Angle.

Con esta opción se puede orientar el taper con el ángulo que se desee si es necesario.

##### d. Channel Thickness Tapering

Se puede introducir un taper vertical (eje y) que estreche el taper creado. Se puede seleccionar un taper lineal, en el que los puntos Start-End que aparecen indican la altura de la guía al principio y al final de la misma, creando un taper lineal en base a esos dos datos.

##### e. Width

Indica la anchura del taper al inicio y al final.

##### f. Depth

Indica la posición en el eje y. Sólo válido en 3D.

##### g. Label

Nombre asignado al taper, se puede poner automáticamente o asignarle un nombre manualmente.

##### h. Profile

Se selecciona un perfil creado con el *Profile Designer*. Se puede seleccionar desplegando una lista de los perfiles ya creados, o crear uno nuevo abriendo el *Profile Designer* con el botón en el que pone *Profiles In Use...*

### e) S-Bend Sine Arc Taper

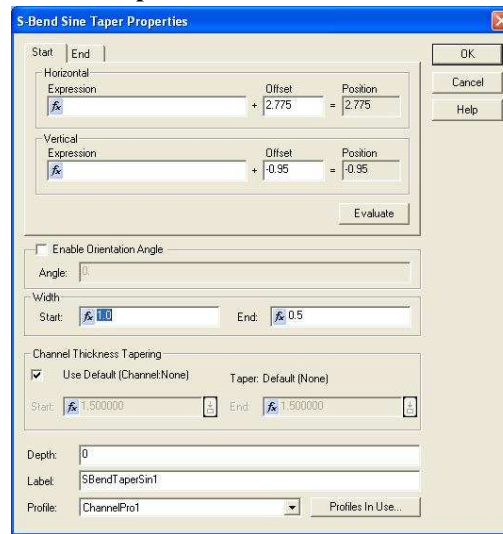


Figura I. 23 S-bend Sine Arc Taper Properties

#### a. Pestañas Start/End.

En estas pestañas se introduce la posición (vertical y horizontal del plano XZ) inicial y final del taper, cuya forma seguirá una función senoidal (1/2 Periodo máximo). Se puede introducir una expresión matemática pinchando sobre el botón  $f_x$ , pero si la posición no depende de ninguna variable se suele usar el *Offset*. Se pueden combinar y usar una expresión y un offset.

#### b. Enable Orientation Angle.

Con esta opción se puede orientar el taper con el ángulo que se desee si es necesario.

#### c. Channel Thickness Tapering

Se puede introducir un taper vertical (eje y) que estreche el taper creado. Se puede seleccionar un taper lineal, en el que los puntos Start-End que aparecen indican la altura de la guía al principio y al final de la misma, creando un taper lineal en base a esos dos datos.

#### d. Width

Indica la anchura del taper al inicio y al final.

#### e. Depth

Indica la posición en el eje y. Sólo válido en 3D.

#### f. Label

Nombre asignado al taper, se puede poner automáticamente o asignarle un nombre manualmente.

#### g. Profile

Se selecciona un perfil creado con el *Profile Designer*. Se puede seleccionar desplegando una lista de los perfiles ya creados, o crear uno nuevo abriendo el *Profile Designer* con el botón en el que pone *Profiles In Use...*

## f) S-Bend Cosine Arc Taper

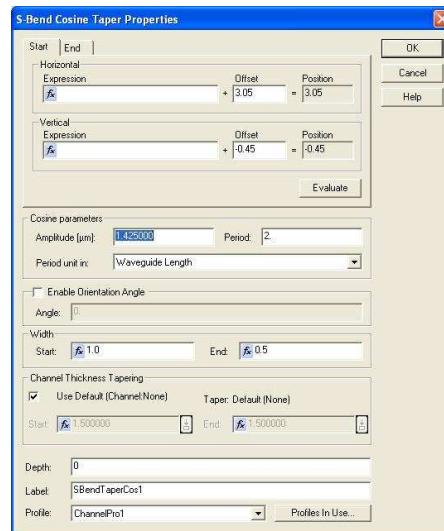


Figura I. 24 S-bend Cosine Arc Taper Properties

### a. Pestañas Start/End.

En estas pestañas se introduce la posición (vertical y horizontal del plano XZ) inicial y final del taper, cuya forma seguirá una función cosenoidal. Se puede introducir una expresión matemática pinchando sobre el botón  $f_x$ , pero si la posición no depende de ninguna variable se suele usar el *Offset*. Se pueden combinar y usar una expresión y un offset.

### b. Cosine Parameters.

Hay que editar los parámetros del coseno como se desee, la amplitud y el periodo. Se puede introducir el periodo en función de la longitud del taper o directamente en micras.

### c. Enable Orientation Angle.

Con esta opción se puede orientar el taper con el ángulo que se desee si es necesario.

### d. Channel Thickness Tapering

Se puede introducir un taper vertical (eje y) que estreche el taper creado. Se puede seleccionar un taper lineal, en el que los puntos Start-End que aparecen indican la altura de la guía al principio y al final de la misma, creando un taper lineal en base a esos dos datos.

### e. Width

Indica la anchura del taper al inicio y al final.

### f. Depth

Indica la posición en el eje y. Sólo válido en 3D.

### g. Label

Nombre asignado al taper, se puede poner automáticamente o asignarle un nombre manualmente.

### h. Profile

Se selecciona un perfil creado con el *Profile Designer*. Se puede seleccionar desplegando una lista de los perfiles ya creados, o crear uno nuevo abriendo el *Profile Designer* con el botón en el que pone *Profiles In Use...*

- Lenses
  - a) Circular Lens

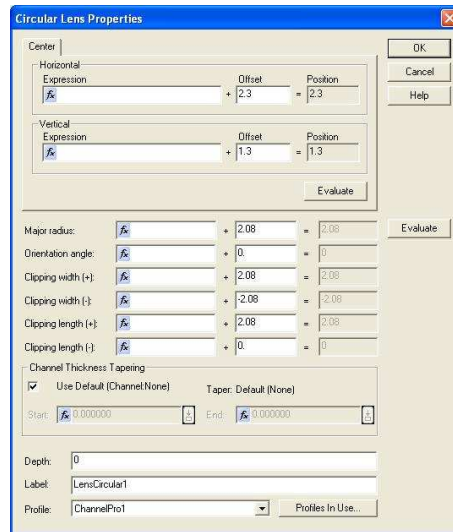


Figura I. 25 Circular Lens Properties

a. Pestaña Center.

En estas pestañas se introduce la posición (vertical y horizontal del plano XZ) central de la lente. Se puede introducir una expresión matemática pinchando sobre el botón  $f_x$ , pero si la posición no depende de ninguna variable se suele usar el *Offset*. Se pueden combinar y usar una expresión y un offset.

b. Major Radius.

Permite la creación de una lente circular mediante el radio de la misma.

c. Orientation Angle.

Con esta opción se puede orientar la lente con el ángulo que se desee si es necesario (180° para darle la vuelta).

d. Clipping Width +/-

Sirve para recortar la anchura de la lente.

e. Clipping Length +/-

Sirve para recortar la longitud de la lente.

f. Channel Thickness Tapering

Se puede introducir un taper vertical (eje y) que estreche la lente creada. Se puede seleccionar un taper lineal, en el que los puntos Start-End que aparecen indican la altura de la guía al principio y al final de la misma, creando un taper lineal en base a esos dos datos.

g. Depth

Indica la posición en el eje y. Sólo válido en 3D.

h. Label

Nombre asignado a la lente, se puede poner automáticamente o asignarle un nombre manualmente.

i. Profile

Se selecciona un perfil creado con el *Profile Designer*. Se puede seleccionar desplegando una lista de los perfiles ya creados, o crear uno nuevo abriendo el *Profile Designer* con el botón en el que pone *Profiles In Use...*

## b) Elliptic Lens

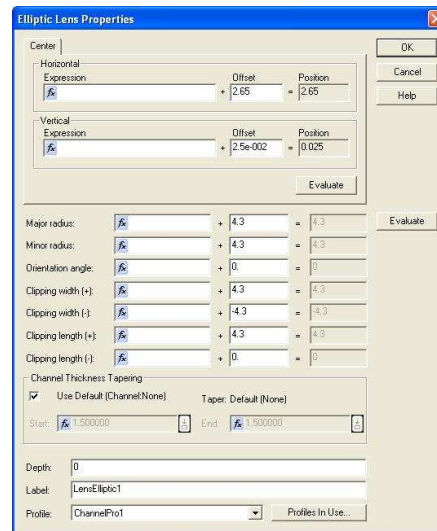


Figura I. 26 Elliptic Lens Properties

### a. Pestaña Center.

En estas pestañas se introduce la posición (vertical y horizontal del plano XZ) central de la lente. Se puede introducir una expresión matemática pinchando sobre el botón  $f_x$ , pero si la posición no depende de ninguna variable se suele usar el *Offset*. Se pueden combinar y usar una expresión y un offset.

### b. Major/Minor Radius.

Permite la creación de una lente elíptica mediante los radios de la misma.

### c. Orientation Angle.

Con esta opción se puede orientar la lente con el ángulo que se desee si es necesario ( $180^\circ$  para darle la vuelta).

### d. Clipping Width +/-

Sirve para recortar la anchura de la lente.

### e. Clipping Length +/-

Sirve para recortar la longitud de la lente.

### f. Channel Thickness Tapering

Se puede introducir un taper vertical (eje y) que estreche la lente creada. Se puede seleccionar un taper lineal, en el que los puntos Start-End que aparecen indican la altura de la guía al principio y al final de la misma, creando un taper lineal en base a esos dos datos.

### g. Depth

Indica la posición en el eje y. Sólo válido en 3D.

### h. Label

Nombre asignado a la lente, se puede poner automáticamente o asignarle un nombre manualmente.

### i. Profile

Se selecciona un perfil creado con el *Profile Designer*. Se puede seleccionar desplegando una lista de los perfiles ya creados, o crear uno nuevo abriendo el *Profile Designer* con el botón en el que pone *Profiles In Use...*

### c) Parabolic Lens

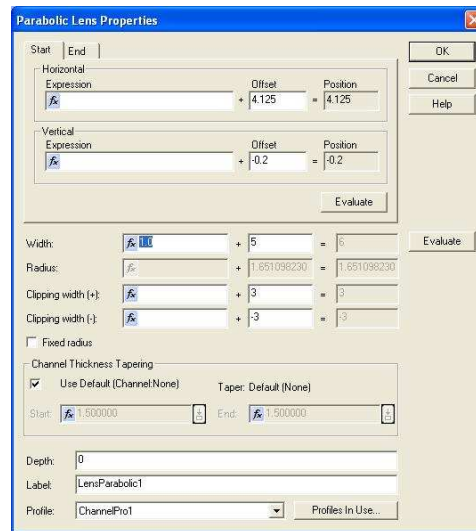


Figura I. 27 Parabolic Lens Properties

#### a. Pestaña Start/End.

En estas pestañas se introduce la posición (vertical y horizontal del plano XZ) inicial y final de la lente. Se puede introducir una expresión matemática pinchando sobre el botón  $f_x$ , pero si la posición no depende de ninguna variable se suele usar el *Offset*. Se pueden combinar y usar una expresión y un *offset*.

#### b. Width

Se puede asignar la anchura que tendrá la lente parabólica.

#### c. Radius.

Permite la creación de una lente parabólica mediante el uso del radio de la misma. Para usar el radio hay que activar la pestaña *Fixed Radius*.

#### d. Orientation Angle.

Con esta opción se puede orientar la lente con el ángulo que se desee si es necesario ( $180^\circ$  para darle la vuelta).

#### e. Clipping Width +/-

Sirve para recortar la anchura de la lente.

#### f. Channel Thickness Tapering

Se puede introducir un taper vertical (eje y) que estreche la lente creada. Se puede seleccionar un taper lineal, en el que los puntos Start-End que aparecen indican la altura de la guía al principio y al final de la misma, creando un taper lineal en base a esos dos datos.

#### g. Depth

Indica la posición en el eje y. Sólo válido en 3D.

#### h. Label

Nombre asignado a la lente, se puede poner automáticamente o asignarle un nombre manualmente.

#### i. Profile

Se selecciona un perfil creado con el *Profile Designer*. Se puede seleccionar desplegando una lista de los perfiles ya creados, o crear uno nuevo abriendo el *Profile Designer* con el botón en el que pone *Profiles In Use...*

#### d) Hyperbolic Lens

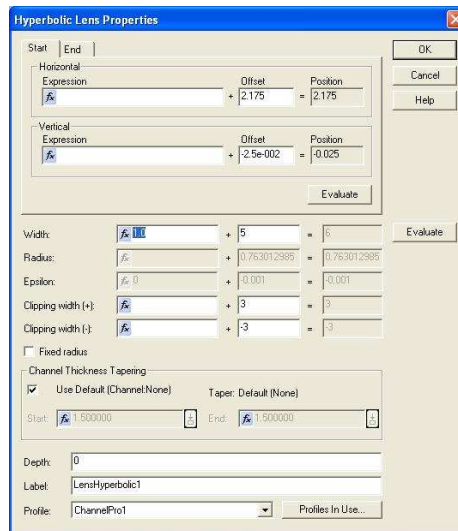


Figura I. 28 Hyperbolic Lens Properties

##### a. Pestaña Start/End.

En estas pestañas se introduce la posición (vertical y horizontal del plano XZ) inicial y final de la lente. Se puede introducir una expresión matemática pinchando sobre el botón  $f_x$ , pero si la posición no depende de ninguna variable se suele usar el *Offset*. Se pueden combinar y usar una expresión y un *offset*.

##### b. Width

Se puede asignar la anchura que tendrá la lente hiperbólica.

##### c. Radius/Epsilon.

Permite la creación de una lente hiperbólica mediante el uso del radio y la  $\epsilon$  de la misma. Para usar esto hay que activar la pestaña *Fixed Radius*.

##### d. Orientation Angle.

Con esta opción se puede orientar la lente con el ángulo que se desee si es necesario ( $180^\circ$  para darle la vuelta).

##### e. Clipping Width +/-

Sirve para recortar la anchura de la lente.

##### f. Channel Thickness Tapering

Se puede introducir un taper vertical (eje y) que estreche la lente creada. Se puede seleccionar un taper lineal, en el que los puntos Start-End que aparecen indican la altura de la guía al principio y al final de la misma, creando un taper lineal en base a esos dos datos.

##### g. Depth

Indica la posición en el eje y. Sólo válido en 3D.

##### h. Label

Nombre asignado a la lente, se puede poner automáticamente o asignarle un nombre manualmente.

##### i. Profile

Se selecciona un perfil creado con el *Profile Designer*. Se puede seleccionar desplegando una lista de los perfiles ya creados, o crear uno nuevo abriendo el *Profile Designer* con el botón en el que pone *Profiles In Use...*

## • Polynomial Waveguides

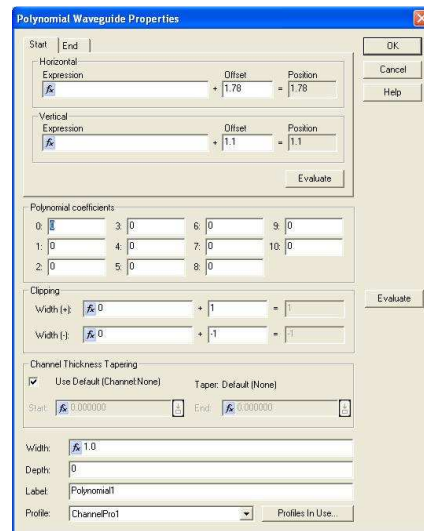


Figura I. 29 Polynomial Waveguide Properties

### a. Pestañas Start/End.

En estas pestañas se introduce la posición (vertical y horizontal del plano XZ) inicial y final de la guía. Se puede introducir una expresión matemática pinchando sobre el botón  $f_x$ , pero si la posición no depende de ninguna variable se suele usar el *Offset*. Se pueden combinar y usar una expresión y un *offset*.

### b. Polynomial Coefficients (0-10).

La guía seguirá la función polinómica según los coeficientes que se le introduzcan.

### c. Channel Thickness Tapering.

Se puede introducir un taper vertical (eje y) que estreche la guía creada. Se puede seleccionar un taper lineal, en el que los puntos Start-End que aparecen indican la altura de la guía al principio y al final de la misma, creando un taper lineal en base a esos dos datos.

### d. Width

Indica la anchura de la guía en el eje x. El grosor de la guía en 3D, eje y, se indica en el *Profile Designer*.

### e. Depth

Indica la posición en el eje y. Sólo válido en 3D.

### f. Label

Nombre asignado a la guía, se puede poner automáticamente o asignarle un nombre manualmente.

### g. Profile

Se selecciona un perfil creado con el *Profile Designer*. Se puede seleccionar desplegando una lista de los perfiles ya creados, o crear uno nuevo abriendo el *Profile Designer* con el botón en el que pone *Profiles In Use...*



## • PBG Crystal Structure

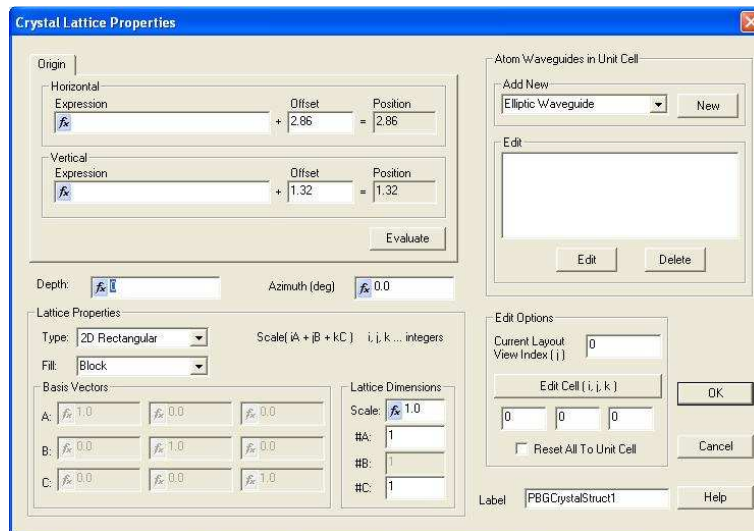


Figura I. 30 Crystal Lattice Properties

### a. Pestaña Origin.

En esta pestaña se introduce la posición (vertical y horizontal del plano XZ) origen de la estructura de cristal fotónico. Se puede introducir una expresión matemática pinchando sobre el botón  $f_x$ , pero si la posición no depende de ninguna variable se suele usar el *Offset*. Se pueden combinar y usar una expresión y un offset.

### b. Depth/Azimuth

Indica la posición en el eje y (profundidad, en 3D) y la orientación del cristal fotónico en el plano XZ.

### c. Lattice Properties

Se puede elegir el tipo de celosía del cristal fotónico y el tipo de llenado de la misma. Eligiendo un tipo de celosía predeterminada los vectores de la base aparecen automáticamente, aunque se pueden seleccionar los que se quieran usando la opción *User Defined*.

En el cuadro *Lattice Dimensions* se puede poner la escala (se suele usar la constante de red) y las dimensiones en los tres ejes, siendo agujeros o pilares, o bolas o lo que se quiera.

### d. Atom Waveguide in Unit Cell

En este cuadro se puede elegir el tipo de guía o esfera o lente que será replicado en el cristal fotónico. Al elegir esto se abre una ventana como las que se han mostrado anteriormente. Con el perfil de estas guías es con lo que se selecciona el grosor del cristal fotónico.

### e. Edit Options

Si se quiere editar un elemento individualmente se puede realizar en este cuadro, o también utilizando el *PBG Crystal Structure Cell Editing Tool* del menú directo *Tools*, y haciendo doble clic en el elemento a modificar.

### f. Label

Nombre asignado al cristal fotónico, se puede poner automáticamente o asignarle un nombre manualmente.

### I.2.1.3 Simulation.



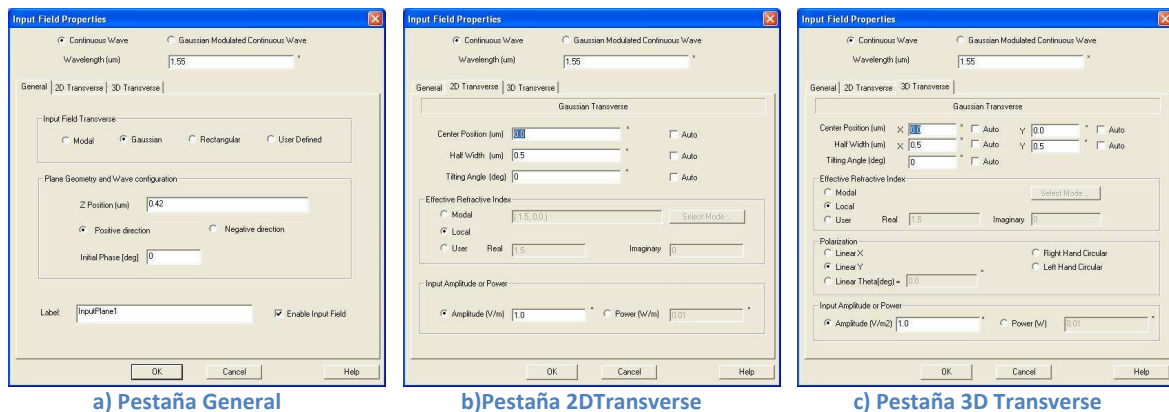
Figura I. 31 Menú Simulation

En este menú se encuentran las fuentes de luz, y los elementos que sirven para recopilar información de las simulaciones. Primero se verán las fuentes de luz:

- **Vertical/Horizontal Input Plane Wave.**

El *Input Plane Wave* es la fuente de ondas electromagnéticas del OptiFDTD 8.0, y traen consigo una variedad de opciones que se enumerarán a continuación:

#### a) Continuous Wave.



a) Pestaña General

b) Pestaña 2D Transverse

c) Pestaña 3D Transverse

Figura I. 32 Propiedades Input Plane Continuous Wave

El *Input Plane Wave* trae consigo dos opciones en función de si se trata de una onda electromagnética continua, tipo láser, o un pulso electromagnético gaussiano en el tiempo. Las opciones del modo *Continuous Wave* son generales para la llamada Continuous Wave y para la *Gaussian Modulated Continuous Wave* que se verá más adelante. Se trata de tres pestañas (figura I.32) que se describen a continuación.

#### a. Pestaña General.

En esta pestaña se seleccionan las características más básicas de la fuente de onda electromagnética.

##### i. Input Field Transverse

Se puede elegir como será la onda electromagnética, se dan cuatro opciones: **Modal**, **Gaussian**, **Rectangular** y **User Defined**.

- **Modal:** Se verá más adelante.
- **Gaussian:** El frente de onda es gaussiano.
- **Rectangular:** El frente de onda es plano/rectangular.

- **User Defined:** El frente de onda es definido por el usuario manualmente.

### ii. Plane Geometry and Wave Configuration

Se define la posición de la fuente de luz, así como el sentido del haz y la orientación del mismo. *Positive direction* indica que el sentido del haz es Z+ para el *Vertical Input Plane Wave*.

### iii. Label

Es simplemente el nombre de la fuente de luz.

## b. Pestaña 2D Transverse.

**Figura I.32-b.**

### i. Propiedades Espaciales del Haz

Para simulaciones en 2D se deben indicar los parámetros de la forma espacial del haz. Los parámetros son espaciales y de orientación del haz, en grados.

### ii. Effective Refractive Index

Se puede seleccionar como será el índice de refracción en la simulación, el *Local* es el más común.

### iii. Input Amplitude or Power

Se puede seleccionar la amplitud de la onda electromagnética en V/m o la potencia de la misma en W/m.

## c. Pestaña 3D Transverse.

**Figura I.32-c**

### i. Propiedades Espaciales del Haz

Para simulaciones en 3D se deben indicar los parámetros de la forma espacial del haz. Los parámetros son espaciales y de orientación del haz, en grados.

### ii. Effective Refractive Index

Se puede seleccionar como será el índice de refracción en la simulación, el *Local* es el más común.

### iii. Polarization

Se puede controlar la polarización de la onda electromagnética como se desee. A parte de poder poner polarización lineal en el eje x o y, se puede disponer polarización circular a izquierdas y a derechas y polarización lineal a cualquier ángulo que se desee.

### iv. Input Amplitude or Power

Se puede seleccionar la amplitud de la onda electromagnética en V/m o la potencia de la misma en W/m.

## b) Gaussian Modulated Continuous Wave.

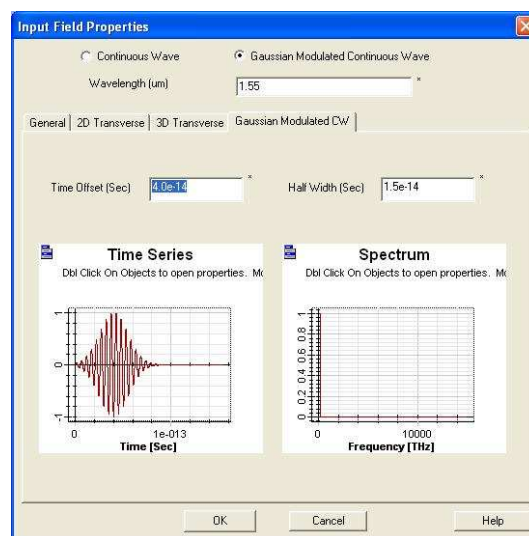


Figura I. 33 Propiedades Gaussian Modulated Continuous Wave

El *Gaussian Modulated Continuous Wave* permite aplicar una modulación de amplitud gaussiana a un pulso electromagnético. Esta modulación permite hacer simulaciones cubriendo una región del espectro que no se podría hacer con una onda continua normal, puesto que el espectro es muy estrecho. De este modo se pueden realizar simulaciones con un espectro lo suficientemente ancho como para comprobar frecuencias de corte de guías o filtros, etc.

En esta pestaña se puede modificar tanto el offset del pulso, así como el *Half Width*, pudiendo controlar la anchura del espectro de este modo.

### Nota: Input Field Modal.

El programa OptiFDTD 8.0 permite seleccionar los modos de la guía para excitarlos con ellos directamente **figura I.34**, el proceso no es muy complicado y se detalla a continuación. El programa permite calcular los modos que se quieran de guías y de fibras ópticas, pero **no permite calcular los modos en una guía creada en cristales fotónicos** (por ejemplo, mediante una línea de defecto). Si se desea calcular los modos directamente con las opciones del Input Field, lo que se puede hacer es poner un trozo pequeño de guía antes de la guía de cristal fotónico a modo de acoplamiento, del mismo tamaño, y así calcular los modos deseados.

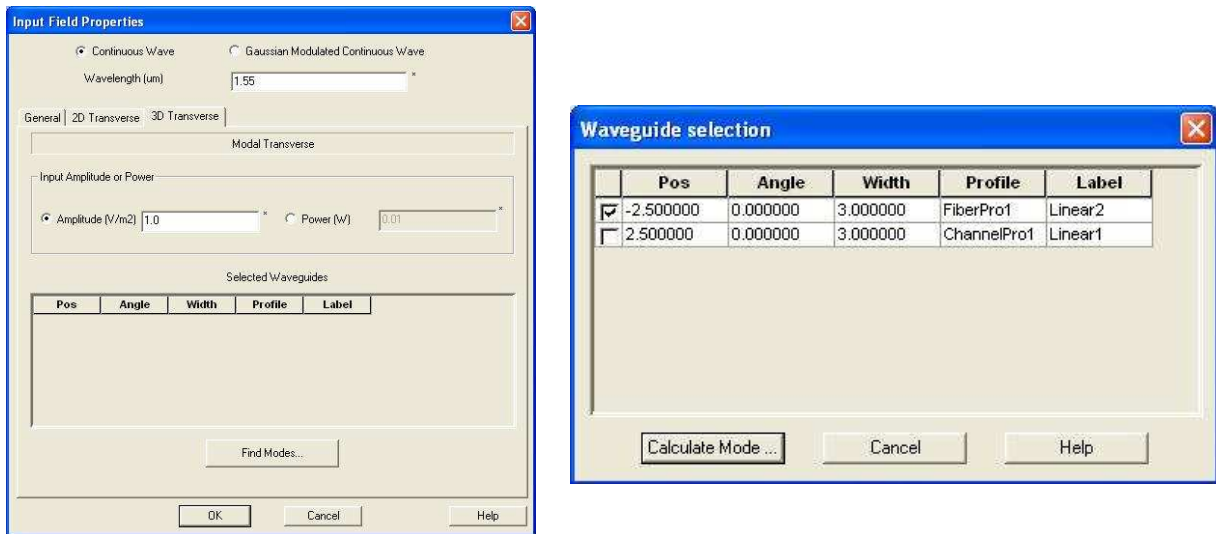
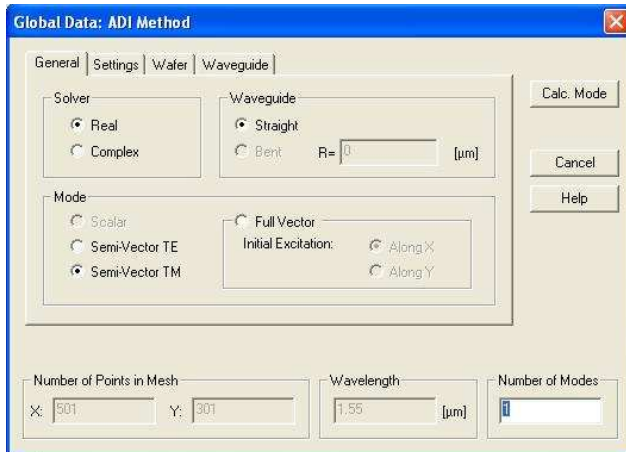
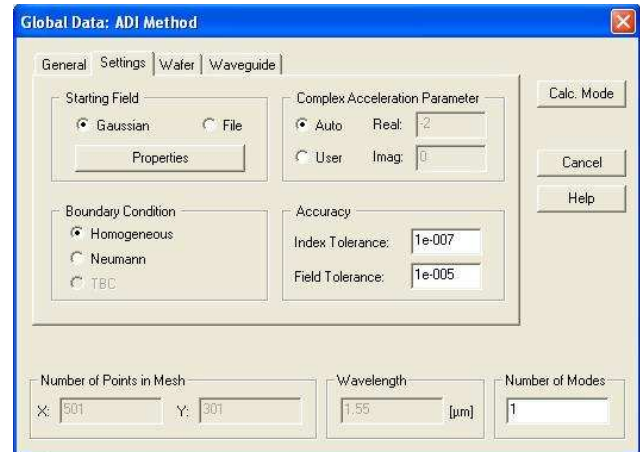


Figura I. 34 Input Field Modal

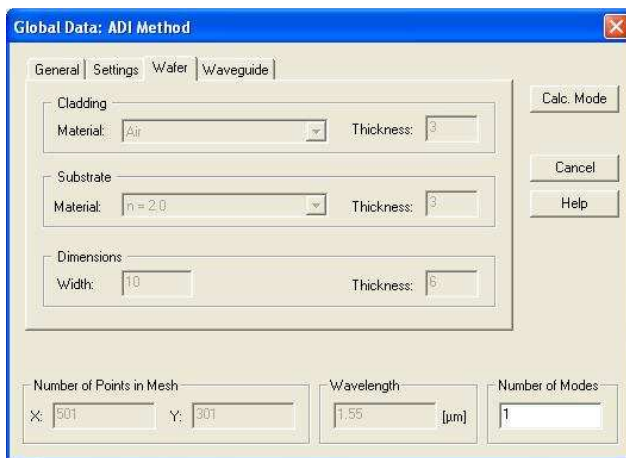
Para calcular los modos de una guía o fibra, hay que seleccionar *Modal* en *Input Field Transverse*, y pulsar *Find Modes...* en la pestaña *2D/3D Transverse*. Al hacer esto se abre una ventana con cuatro pestañas, **figura I.35**. El cálculo de los modos se realiza tras realizar algunas especificaciones sobre si se quiere un modo TE o TM, o si se trata de una guía recta o una curvada. La explicación de cada opción se puede encontrar en [I.2].



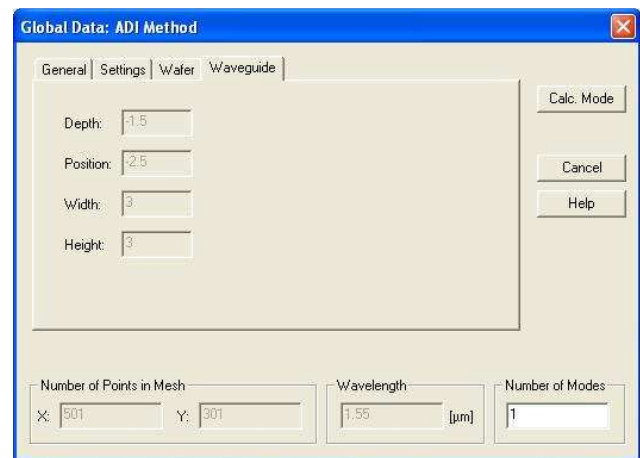
a) Global Data: ADI Method - General



b) Global Data: ADI Method - Settings



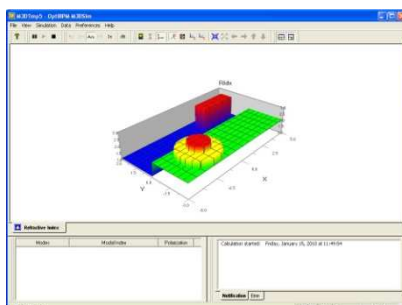
c) Global Data: ADI Method - Wafer



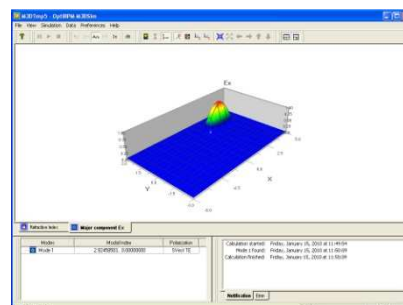
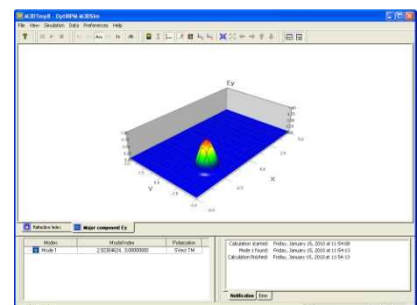
d) Global Data: ADI Method - Waveguide

Figura I. 35 Global Data: ADI Method – Para el cálculo de modos de una guía/fibra óptica

Tras modificar las opciones como se desee, se calculan los modos pulsando el botón *Calc. Mode*. Se abre una ventana nueva, el llamado *Mode Solver*, mostrando el índice de refracción de la guía y los modos calculados, **figura I.36**.



a) Indices de Refracción


b) Modo calculado guía  
Figura I. 36 Mode Solver


c) Modo calculado fibra

- **Point Source.**

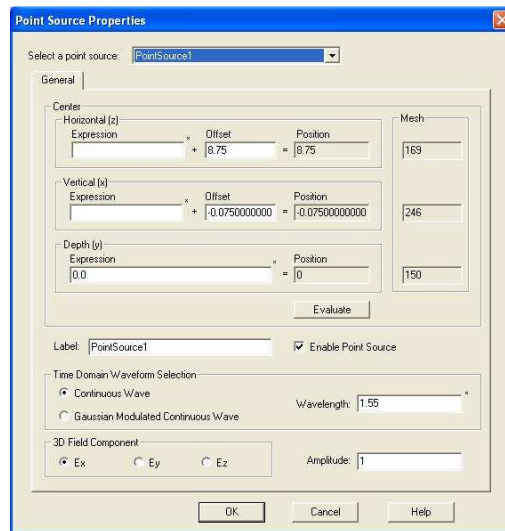


Figura I. 37 Point Source

El *Point Source* es una fuente de luz puntual cuyo frente de onda esférico en tres dimensiones. El Point Source sólo muestra una pestaña de propiedades:

**a. Pestaña General.**

i. Center

En este grupo se selecciona la posición de la fuente puntual, de modo que se modifica la posición en el eje vertical (x), horizontal (z) y la profundidad (y).

ii. Label

Es el nombre que tomará la fuente de luz.

iii. Time Domain Waveform Selection

Se puede seleccionar una onda continua o un pulso gaussiano en el dominio temporal como en el *Input Plane*. Si se selecciona el pulso gaussiano aparece una pestaña nueva como se ha visto anteriormente.

iv. 3D Field Component

Es la componente del campo.

Una vez visto las posibilidades del programa en cuanto a las fuentes de luz, se continuará con una breve descripción de las herramientas disponibles para recopilar datos en las simulaciones. En este apartado se verán el *Observation Point*, la *Observation line* y el *Observation Area*.

- **Observation Point.**

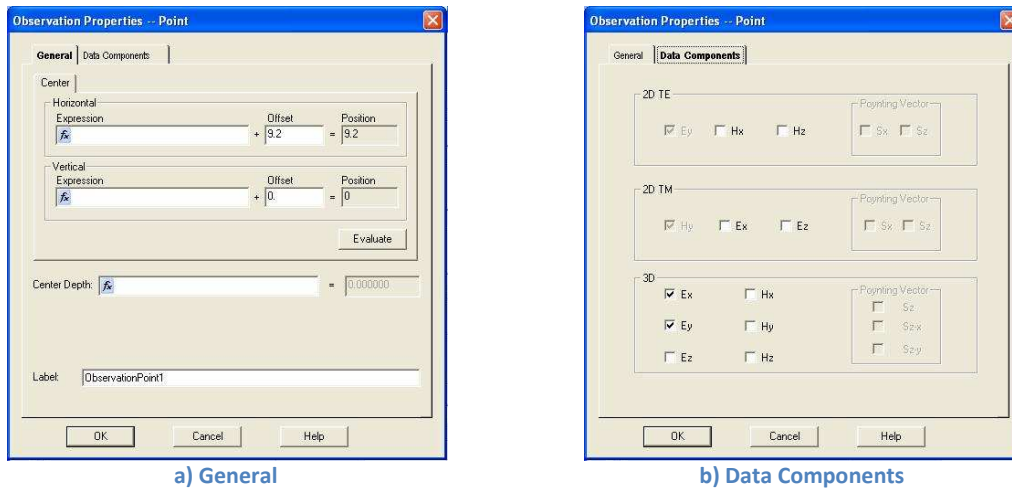


Figura I. 38 Observation Point

El *Observation Point* es un recolector de datos puntual que se puede situar en cualquier punto del volumen de simulación si es en 3D, en 2D se puede situar en cualquier punto del plano XZ. La pestaña general sirve para indicar la posición en la que se situará el punto de observación y el nombre del mismo como ha podido verse anteriormente con otros elementos o estructuras del programa.

La pestaña *Data Components*, que se encuentra también en las otras herramientas de recopilación de datos, permite seleccionar las componentes de campo sobre las que se guardará datos. Si se trata de una simulación 2D o 3D se deben seleccionar las componentes adecuadas.

- **Observation Line.**

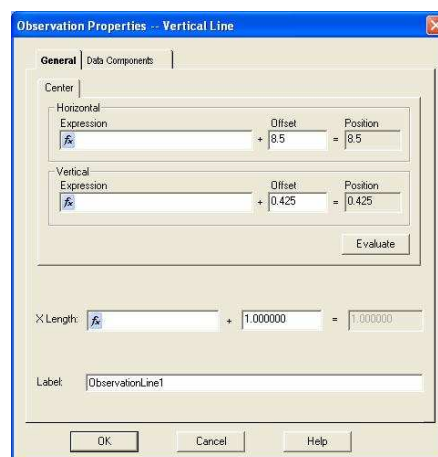


Figura I. 39 Observation Line

La *Observation Line* recopila datos sólo en **simulaciones 2D**, cumple la función de la *Observation Area* pero en 2D. Los datos se recopilan a lo largo de una línea situada en la



posición deseada, y el uso de esta herramienta para recolectar datos puede eliminar algunos problemas que se pueden crear con el punto de observación, sobre todo referidos a mostrar más potencia recibida de la real.

- **Observation Area.**

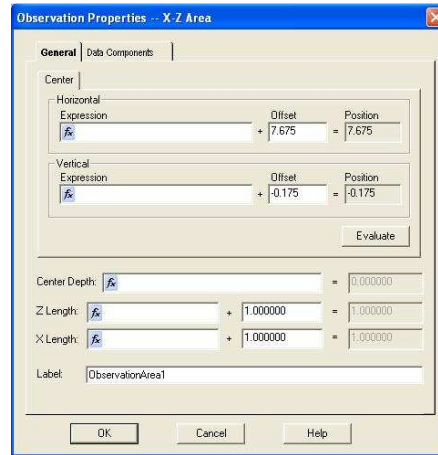


Figura I. 40 Observation Area

La *Observation Area* recopila datos a lo largo de un área delimitada por el usuario, y puede situarse en todos los planos deseados. **Solo se puede usar en simulaciones 3D**, y su uso puede evitar errores de los puntos de observación, tal y como sucede con las líneas de observación.

## I.2.2 OptiFDTD Simulator.

Una vez se tienen todos los elementos necesarios para la simulación, es decir, el layout, con la fuente electromagnética y los puntos de observación, se puede lanzar el simulador. Es esta herramienta la que realiza los cálculos necesarios a partir de las ecuaciones de Maxwell para llevar a cabo la simulación.

El acceso a la ventana de los parámetros de la simulación se hace desde el menú *Simulation*, del cual se puede acceder a un menú desplegable con la opción de realizar una simulación en 2D o 3D, entre otras cosas, como puede verse en la **figura I.41**.



**Figura I. 41 Menu Simulation**

Las opciones deshabilitadas de la **figura I.41**, *2D FDTD Band Solver Parameters* y *PWE Band Solver Parameters* sólo se habilitan cuando la simulación contiene una estructura periódica creada con el *PBG Crystal Structure*, y se explican en el **Anexo II. Band Solver**.

Las tres opciones siguientes, *Simulate 2D/3D Using 64-bit Simulator* y *Simulate 3D Using Accelerator Card*, se utilizan cuando se tiene un sistema operativo de 64 bits o una tarjeta grafica para poder realizar simulaciones más eficientes que no lleven tanto tiempo como en el modo normal.

Las siguientes cuatro opciones, *Test Script* y *Generate Template/Layout/Scanning Script* sirven para utilizar la herramienta de Scripts de Visual Basic que se explica en el **Anexo III. VB Script**.

Aunque los parámetros de la simulación en 2D y 3D son muy parecidos, a continuación se detallará las características de cada uno por separado. La realización de simulaciones en 2D o 3D dependerá de si el layout se ha realizado en 2D o en 3D, y generalmente las diferencias más destacadas entre una simulación y otra es la memoria RAM requerida y el tiempo necesario para llevar a cabo la simulación. Generalmente la memoria y el tiempo de simulación requeridos son mucho mayores en una simulación en 3D.

- **2D Simulation Parameters.**

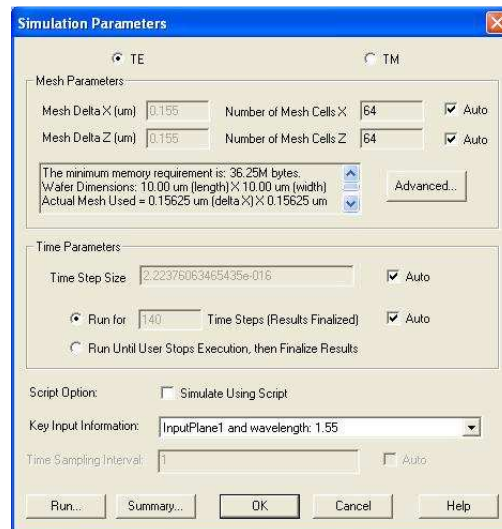


Figura I. 42 2D Simulation Parameters

Lo primero que destaca en esta ventana es la posibilidad de seleccionar el modo de polarización TE o TM. Posteriormente la ventana tiene distintas opciones.

a. Mesh Parameters.

Los *Mesh Parameters* indican el paso espacial de la simulación, que deben cumplir ciertos criterios que se han mencionado al principio del anexo. Para el caso bidimensional se seleccionan para el eje x y z, formando así una cuadrícula de áreas independientes para las ecuaciones de Maxwell. El tamaño se puede poner automática o manualmente.

Un tamaño menor de paso espacial implica un tamaño de memoria mayor. El tamaño de memoria requerida se muestra en la ventana inmediatamente debajo de *Mesh Delta Z*.

El botón *Advanced...* que aparece en este grupo de opciones sirve para determinar las características de las condiciones de contorno de la simulación, como puede verse en el **Anexo IV. Condiciones de Contorno y Modelos de Materiales**.

b. Time Parameters.

El paso temporal debe cumplir unas condiciones, tal y como se ha mostrado al principio del anexo, por lo que se debe seleccionar un paso temporal capaz de cumplirlas. El paso temporal se suele seleccionar automáticamente según el número de pasos de la simulación, que suele ser el que se modifica.

También existe la posibilidad de correr la simulación hasta que el usuario decida detenerla cuando sea suficiente.

c. Script Option.

Se selecciona esta opción cuando la simulación vaya a realizar llamadas a funciones declaradas usando un script, ver **Anexo III.VB Script**.

d. Key Input Information.

No se puede seleccionar más que una fuente de luz por cada simulación a pesar de tener varias en el layout. Aquí se selecciona la fuente que se desea utilizar en la simulación y la longitud de onda utilizada por ésta.

• **3D Simulation Parameters.**

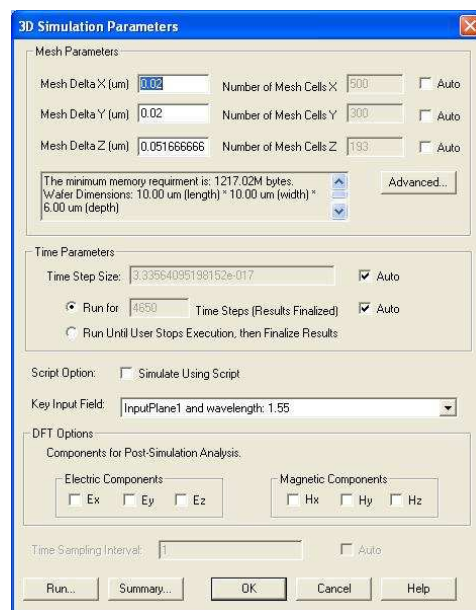


Figura I. 43 3D Simulation Parameters.

a. Mesh Parameters.

Los *Mesh Parameters* indican el paso espacial de la simulación, que deben cumplir ciertos criterios que se han mencionado al principio del anexo. Para el caso bidimensional se seleccionan para el eje x, y y z, formando así una cuadrícula de volúmenes independientes para las ecuaciones de Maxwell. El tamaño se puede poner automática o manualmente.

b. Time Parameters.

El paso temporal debe cumplir unas condiciones, tal y como se ha mostrado al principio del anexo, por lo que se debe seleccionar un paso temporal capaz de cumplirlas. El paso temporal se suele seleccionar automáticamente según el número de pasos de la simulación, que suele ser el que se modifica.

También existe la posibilidad de correr la simulación hasta que el usuario decida detenerla cuando sea suficiente.

## c. Script Option.

Se selecciona esta opción cuando la simulación vaya a realizar llamadas a funciones declaradas usando un script (**Anexo III.VB Script**).

## d. Key Input Information.

No se puede seleccionar más que una fuente de luz por cada simulación a pesar de tener varias en el layout. Aquí se selecciona la fuente que se desea utilizar en la simulación y la longitud de onda utilizada por ésta.

## e. DFT Options.

En el caso 3D se pueden seleccionar las componentes de campo para los que se puede hacer un análisis post simulación. Este análisis post simulación se verá en el siguiente apartado (**I.2.3 OptiFDTD Analyzer**) y es independiente de los análisis que se pueden realizar con los recolectores de datos, es decir, los puntos, líneas y áreas de observación.

Una vez seleccionados todos los parámetros, la simulación se lanza pulsando *Run...* es entonces cuando aparece la ventana de simulación (**figura I.44**), que muestra el progreso del proceso de simulación. La ventana Simulator no permite realizar muchas acciones, solo modificar la vista de la simulación y la componente que se está mostrando en ese momento, abortar la simulación o finalizarla (en el caso de que se haya completado hasta el punto deseado y no se necesite que termine automáticamente).

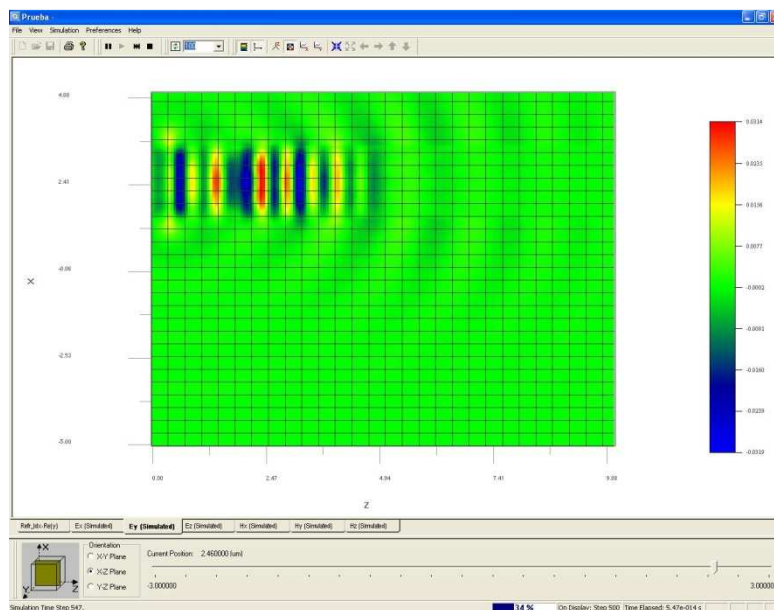


Figura I. 44 Ventana Simulator en una simulación 3D

Como puede verse en la **figura I.44** en la barra de herramientas de arriba se encuentran los botones necesarios para pausar, finalizar o abortar la simulación, así como para indicar cada cuantos pasos temporales se renueva la imagen, y si verla con escala, ejes o en 3D/2D.

Las pestañas de abajo sirven para ver cada una de las componentes de campo que se estén simulando, y la barra de abajo sirve para ver una posición determinada en el plano que se desee moviendo el deslizador.

### I.2.3 OptiFDTD Analyzer.

Tras mostrar cómo se pone una simulación en marcha, ahora se hará una breve descripción de que tratamiento se puede hacer con los datos recolectados, tanto por elementos de observación, como por las herramientas de que dispone el **OptiFDTD Analyzer** para realizar análisis de las simulaciones (*Post-simulation Data Analysis*). Las simulaciones se guardan en un archivo de extensión \*.fda que se abre con el OptiFDTD Analyzer y cuyos datos pueden ser tratados como se quiera. Las posibilidades son amplias, pero conviene destacar también la posibilidad de exportar datos para que puedan ser tratados con otros programas software.

#### I.2.3.1 Análisis Mediante Puntos de Observación.

Como se ha podido ver con anterioridad en el apartado **I.2.1.3 Simulation** existen varios elementos que recopilan datos durante la simulación, y que pueden servir para realizar ciertos análisis de los datos. El acceso a estos datos se hace desde el menú *Tools* de la barra de herramientas del *Analyzer*, y clicar sobre la opción *Observation Area Analysis*.

- **Puntos de Observación (Observation Points)**

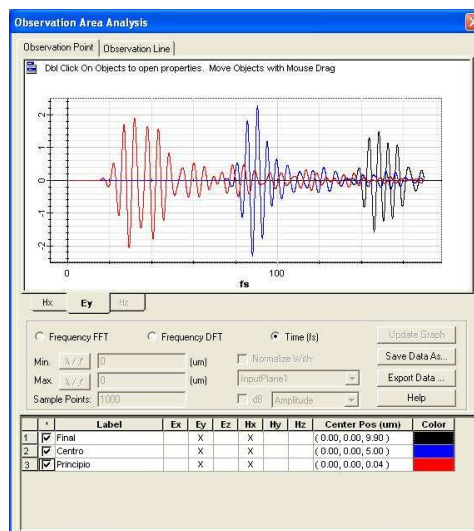


Figura I. 45 Análisis con puntos de observación

El punto de observación muestra los datos recopilados durante la simulación en las posiciones deseadas. Una vez terminada la simulación, los datos recopilados en esos puntos se

muestran en el dominio temporal, y puede hacerse la DFT o FFT de los mismos mostrando una región determinada del espectro. A continuación se describen las características principales.

**a. Time (fs).**

Se muestran las ondas simuladas, la componente se puede elegir mediante las pestañas situadas debajo del área de la gráfica. Las distintas señales recopiladas por distintos puntos de observación se muestran en distintos colores para mayor aclaración, se pueden seleccionar uno o varios en la parte de debajo de la ventana.

**b. Frequency DFT**

Se puede calcular la DFT de las señales anteriores, también existe la opción de mostrar la DFT de la amplitud de la señal, de la parte real, la parte imaginaria y mostrar la fase. También se puede normalizar las DFT a la fuente de luz, así como mostrarlo en dB.

**c. Frequency FFT**

Se puede calcular la FFT de la amplitud de las señales anteriores, pero en este caso solo se puede normalizar la señal a la fuente de luz, no existen más opciones, y los errores en este caso son mayores que en el caso de la DFT.

### Exportar Datos

Existen varias opciones para exportar y guardar datos, la que parece más directa es pulsando el botón *Export Data...* que aparece en la ventana en la **figura I.45**, y luego existe otra forma que puede resultar más rápida que la anterior.

**a. 1ª Forma**

Pulsando el botón *Export Data...* se abre la ventana de la **figura I.46-a**, en esa ventana se puede ver cómo se pueden seleccionar los datos que se quieren exportar. Posteriormente los datos pueden abrirse con la herramienta *Optiwave 2D Viewer* (**figura I.46-b**) para mostrar las gráficas exportadas, o puede guardarse con la extensión *\*.txt* para poder abrirlo con Excel o Matlab, y poder así hacer los tratamientos de datos deseados.



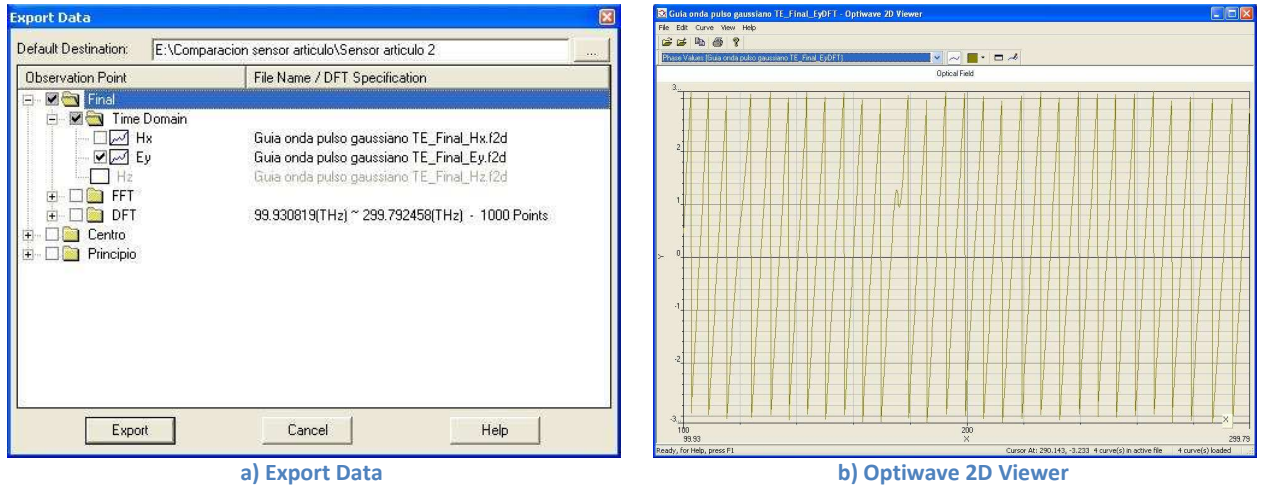


Figura I. 46 Exportar datos

## b. 2ª Forma

La segunda forma de exportar datos, que a priori es más sencilla, se trata simplemente de exportar la curva directamente de la gráfica, pulsando en el menú desplegable de arriba a la izquierda, y seleccionando *Export Data* del menú. En este método conviene guardar cada curva por separado (se selecciona la curva en el momento de exportar, como puede verse en la **figura I.47**), guardadas en formato *\*.txt* su tratamiento con Excel o Matlab es igual de sencillo que en el caso anterior.

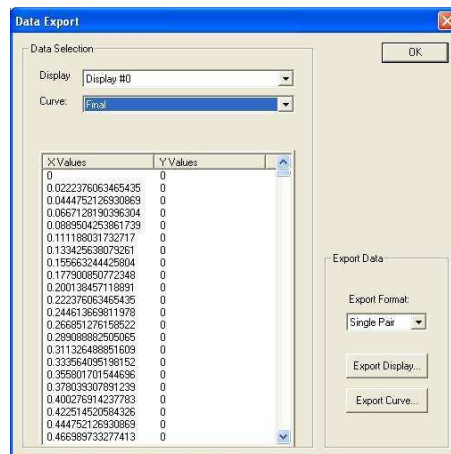
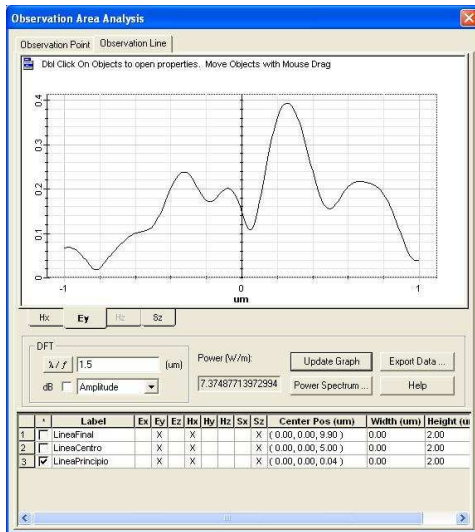


Figura I. 47 Exportar Curva

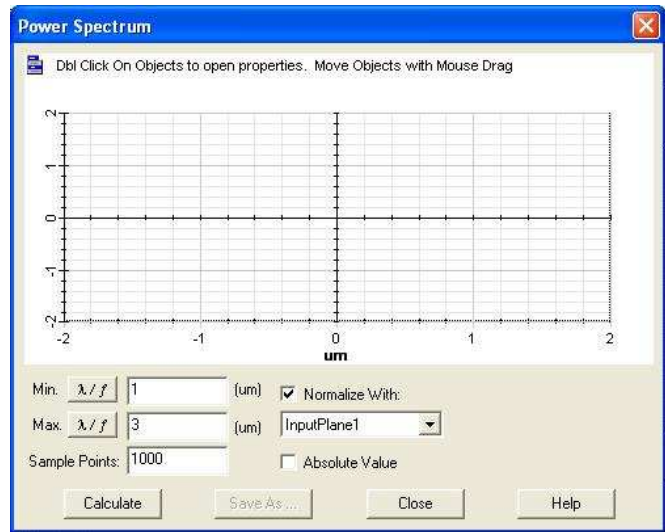
Estos procedimientos son comunes para el resto de elementos de recopilación de datos.



## • Líneas de Observación (Observation Lines)



a) Datos observation line

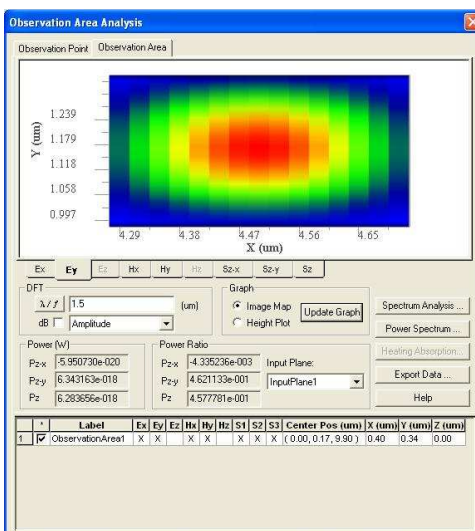


b) Power Spectrum

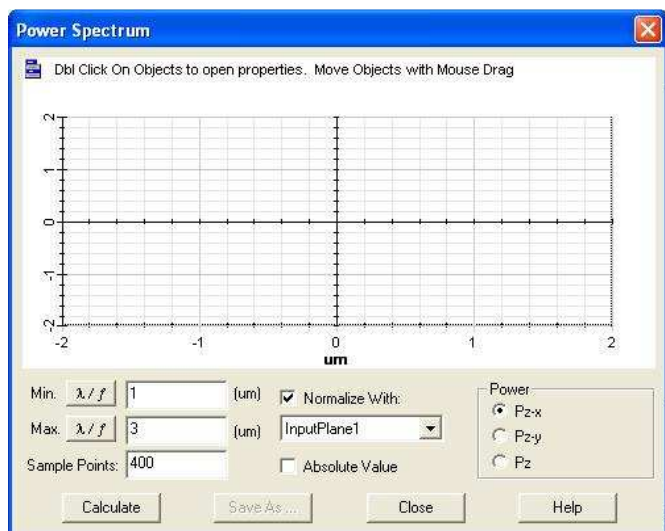
Figura I. 48 Análisis con líneas de observación

Las líneas de observación recopilan datos a lo largo de una línea y solo se puede usar en simulaciones 2D. Se pueden colocar en layouts en 3D, pero si se realiza una simulación en 3D no tiene ningún efecto. Las líneas de observación no muestran señales temporales, si no la DFT de la señal a lo largo de esa línea, y la potencia que la ha atravesado. Se puede sacar la grafica del espectro de potencia pulsando el botón *Power Spectrum...*, aparece una nueva ventana, en la que se puede hacer un análisis de la DFT en función de la longitud de onda, no como en la ventana anterior donde la DFT se calcula en función de la posición para la longitud de onda central de la fuente de luz. Los datos recopilados por la línea de observación se pueden exportar del mismo modo que en el caso de los puntos de observación.

## • Áreas de Observación (Observation Areas)



a) Datos observation area



b) Power Spectrum

Figura I. 49 Análisis con áreas de observación

Las áreas de observación recopilan datos a lo largo de un área y solo se pueden usar en simulaciones 3D. La característica principal de las áreas de observación es que calcula el vector

de poynting entre varias componentes, y se muestra la potencia total que atraviesa el área. También se puede sacar el espectro de potencia en función de la longitud de onda pulsando el botón *Power Spectrum...* tal y como sucedía con las líneas de observación.

### I.2.3.2 Post-simulation Data Analysis.

Los análisis realizados mediante esta herramienta se centran en las componentes de campo seleccionadas en la ventana de propiedades de la simulación 3D. Para las simulaciones 2D también existe la posibilidad de realizar ciertos análisis post-simulación sin necesidad de los puntos de observación, pero este apartado se centrará principalmente en el caso 3D. También se mencionará el equivalente en 2D si existe a lo largo de este apartado.

Como puede verse en la **figura I.50**, la ventana del **OptiFDTD Analyzer** está compuesta de varias partes. En la parte superior se encuentran la barra de herramientas y los modos de visualización de los datos, en el centro a la izquierda se encuentra el menú *Analysis Tools*, que es la herramienta necesaria para llevar a cabo los análisis post-simulación, y en el centro a la derecha se encuentra la visualización de los datos, donde se muestra la DFT de las distintas componentes de campo, que se seleccionan mediante las pestañas situadas debajo. La parte de abajo permite seleccionar el plano y la posición sobre la que se efectuará el análisis.

En caso del Analyzer 2D, el análisis post-simulación se lleva a cabo accediendo desde el menú Tools de la barra de herramientas.

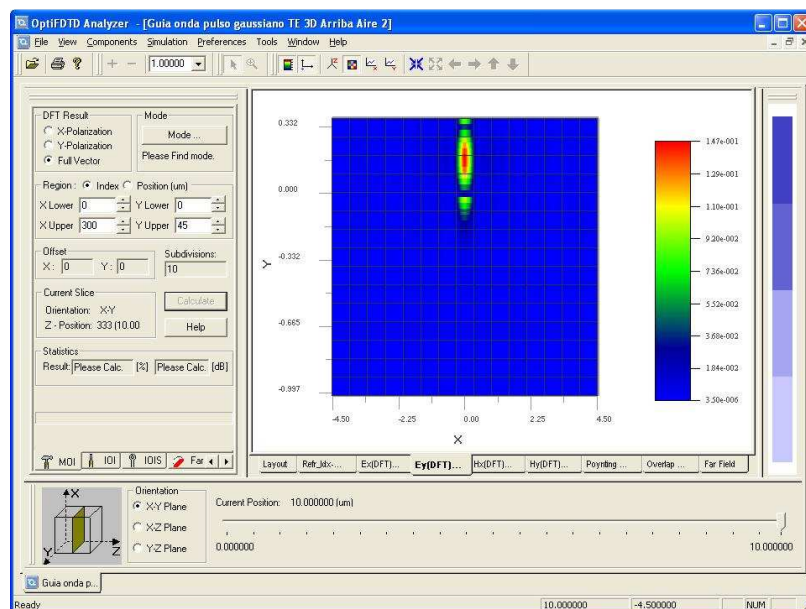
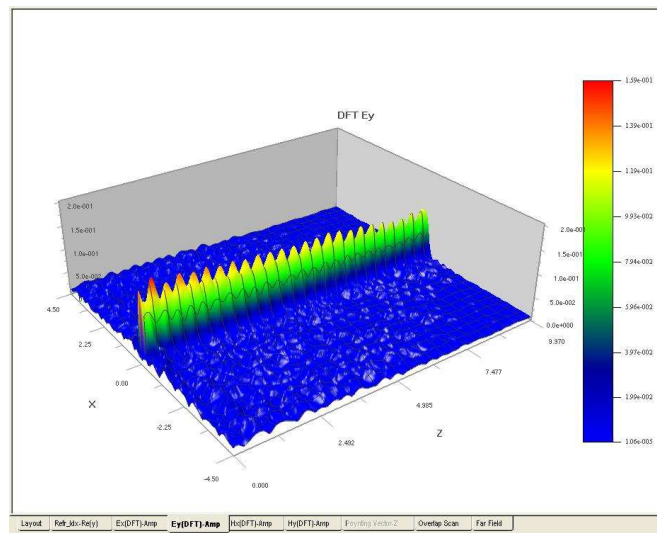


Figura I. 50 Ventana OptiFDTD Analyzer

Las herramientas para el análisis post- simulación se describirán a continuación.

- **Transformada Discreta de Fourier (DFT) y Transformada Rápida de Fourier (FFT).**

El método FDTD, al ser un método de simulación en el dominio temporal, puede calcular toda la respuesta espectral relevante con una sola simulación. Los cálculos de la DFT se realizan al finalizar la simulación, pero antes de lanzar el Analyzer, donde durante este proceso aparece el mensaje *Finalizing* que indica que se están realizando dichos cálculos. El cálculo de la DFT de las componentes de campo deseadas se utiliza para el resto de los análisis post-simulación, tales como el Far Field Pattern, el cálculo del Mode Overlap Integral, etc. Conviene comentar que en el caso de la respuesta en frecuencia calculada en el *Simulator* se realizara solamente para la longitud de onda central de la fuente de luz si esta es un pulso gaussiano, mientras que la respuesta en frecuencia calculada con los puntos, líneas y áreas de observación abarcara la anchura espectral del pulso de la fuente de luz. En la **figura I.51** puede verse la DFT de la componente  $E_y$  para el plano XZ, a mitad de altura de una guía de cristal fotónico de agujeros en silicio sobre una base de óxido de silicio.



**Figura I. 51 DFT de la componente  $E_y$**

La duración del proceso de finalización (*Finalizing*) es diferente para el caso en el que la fuente de luz sea una onda continua o un pulso gaussiano. La duración del proceso para la onda continua es mayor que para el pulso gaussiano, puesto que para el mismo caso, el cálculo de la DFT para la onda continua se utilizan todos los pasos temporales de la simulación, mientras que para el caso del pulso gaussiano tan solo se utilizan los últimos pasos temporales.

La Transformada Discreta de Fourier calcula desde el dominio temporal la respuesta en frecuencia para una sola longitud de onda del siguiente modo:

$$S(\omega) = \int_0^{\tau} s(t) e^{-j\omega t} dt = \sum_{n=0}^N s(n) e^{-j\omega n \Delta t} \Delta t$$

Donde  $s(n)$  es la respuesta en el dominio temporal,  $N$  es el número de pasos temporales, y  $\omega$  es la frecuencia angular.

La FFT utiliza el esquema tradicional de la Transformada Rápida de Fourier para llegar a la respuesta en frecuencia desde la frecuencia cero hasta la frecuencia de corte  $1/2Dt$ , el paso de muestreo en el dominio de la frecuencia de  $1/2NDt$ .

En general, la frecuencia de muestreo para la FFT es comparable a la longitud de onda debido al hecho de que el método FDTD requiere un paso temporal muy pequeño. Por lo tanto, los resultados de la FFT pueden tener un error mucho mayor que los resultados de la DFT, aunque el método sea mucho más rápido. La FFT se puede calcular en la ventana *Observation Area Analysis* para los puntos de observación.

- **Cálculo de Potencia y el Vector de Poynting.**

Para una onda propagándose en el eje z, la potencia total en el plano XY se puede dividir en dos valores de potencia, la polarizada en x propagándose en z ( $P_{zx}$ ) y la polarizada en el eje y propagándose en z ( $P_{zy}$ ). Se calcula estos dos valores del siguiente modo:

$$\text{Potencia para la polarización x: } P_{zx} = \text{Re} \left[ \frac{1}{2} \iint_S \vec{E}_x H_y^* dx dy \right]$$

$$\text{Potencia para la polarización y: } P_{zy} = -\text{Re} \left[ \frac{1}{2} \iint_S \vec{E}_y H_x^* dx dy \right]$$

$$\text{Potencia Total: } P_z = P_{zx} + P_{zy} = \text{Re} \left[ \frac{1}{2} \iint_S \vec{E}_x H_y^* dx dy \right] - \text{Re} \left[ \frac{1}{2} \iint_S \vec{E}_y H_x^* dx dy \right]$$

Donde el punto sobre el campo eléctrico indica el valor complejo que deriva del cálculo de la DFT, y el asterisco en el campo magnético indica el valor complejo conjugado del mismo. El vector de Poynting en la dirección z para un punto (i,j) del plano XY se calcula del siguiente modo:

$$S_z(i,j) = \frac{1}{2} \vec{E}_x(i,j) H_y^*(i,j) - \frac{1}{2} \vec{E}_y(i,j) H_x^*(i,j)$$

El vector de Poynting es un valor complejo, pero en OptiFDTD 8.0 solo se muestran la amplitud del mismo. Una imagen de cómo se ve el vector de Poynting en el Analyzer puede verse en la **figura I.52**.

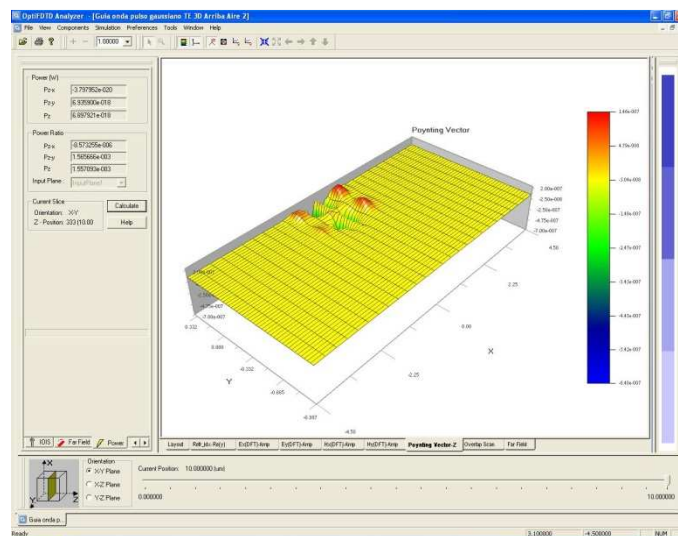


Figura I. 52 Vector de Poynting y cálculo de potencia

### • Overlap Integral (OI)

El *Overlap Integral* calcula el producto y la integral de los dos campos eléctricos en una región específica. El resultado también puede verse como la **Función de Correlación**, o como una **comparación entre dos campos**. El *Overlap Integral* (OI) se define del siguiente modo:

$$OI = \frac{\left| \iint_S \vec{E}_1(x, y) \vec{E}_2^*(x, y) dx dy \right|^2}{\iint_S \left| \vec{E}_1(x, y) \right|^2 dx dy \cdot \iint_S \left| \vec{E}_2(x, y) \right|^2 dx dy}$$

Donde el punto sobre el campo indica el valor y el asterisco indica el valor complejo conjugado del mismo.

El OptiFDTD no muestra directamente este resultado, si no que muestra tres variaciones que se detallan a continuación.

#### a) Mode Overlap Integral (MOI)

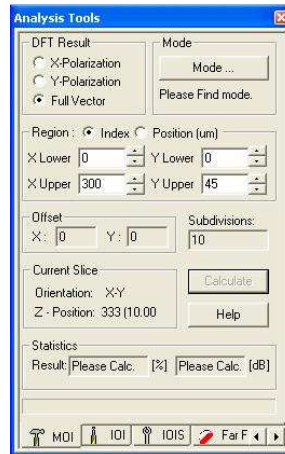


Figura I. 53 Mode Overlap Integral

Para el cálculo de la *Mode Overlap Integral* (**figura I.53**) la primera componente de la ecuación OI es el resultado de la DFT de la simulación para un plano XY seleccionado con el deslizador, y la segunda componente es la componente modal resultante calculada con el *Mode Solver* para el mismo plano. El MOI no se puede calcular más que para guías y fibras, puesto que guías de cristales fotónicos no son consideradas como guías por parte del *Mode Solver*.

### b) Input Overlap Integral (IOI)

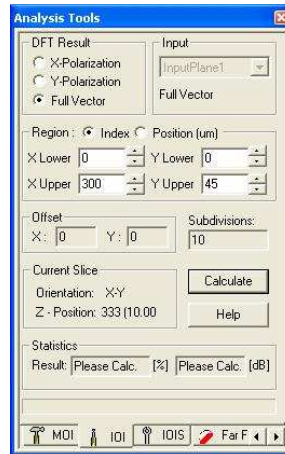


Figura I. 54 Input Overlap Integral

Para el cálculo de la *Input Overlap Integral* (**figura I.54**) la primera componente de la ecuación OI es el resultado de la DFT de la simulación para un plano XY seleccionado con el deslizador, y la segunda componente es la de la onda de la fuente de luz en el mismo plano donde se sitúa ésta. A la IOI también se le llama el *Power Overlap Integral*.

El IOI se entiende como una comparación entre la salida en el plano deseado y la fuente de luz.

### c) Input Overlap Integral Scan (IOIS)

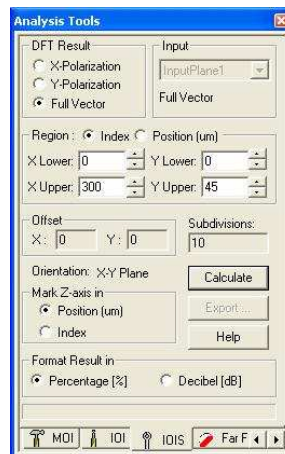


Figura I. 55 Input Overlap Integral Scan

El cálculo de la *Input Overlap Integral Scan* (**figura I.55**) realiza los cálculos IOI para cada uno de los planos XY a lo largo del eje z en los que se divide según el paso espacial en z. El usuario puede observar el porcentaje de la potencia de salida con respecto a la entrada a lo largo del eje de propagación.



- **Far Field Transform.**

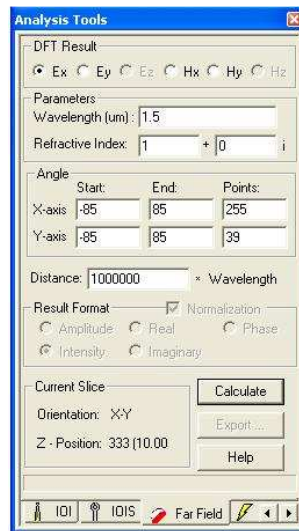


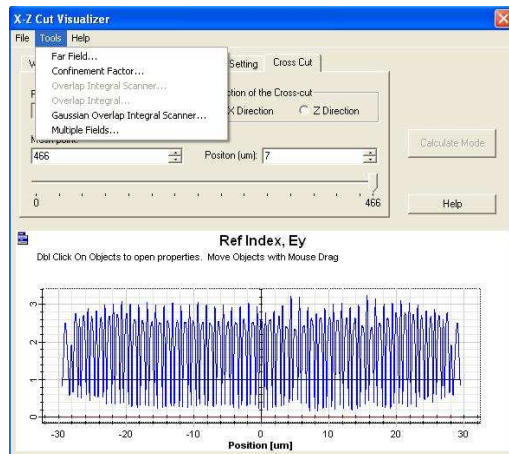
Figura I. 56 Far Field Transform

La transformada en campo lejano (Far Field Transform) se basa en la aproximación de Fraunhofer, de la que se habla en el **Capítulo 4. Difracción de Fraunhofer**. En ese capítulo se hace una breve descripción del principio en el que se basa el cálculo de la transformada en campo lejano, si se desea más información se pueden consultar [I.1] y [I.3].

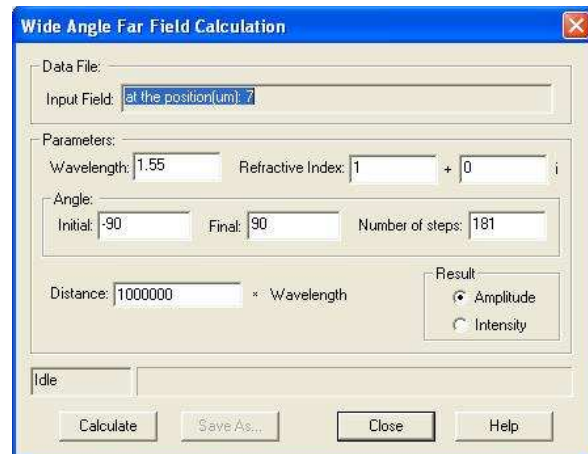
El uso de esta herramienta es muy sencillo, se selecciona la componente de campo sobre la que se desea calcular su transformada en campo lejano, el área a mostrar (en ángulo) y la distancia en longitudes de onda.

Existe la posibilidad de calcular la transformada en campo lejano sobre simulaciones 2D del siguiente modo: Se selecciona del menú *Tools* en el *Analyzer 2D* la opción *Crosscut Viewer*, en este punto. Se abre una ventana llamada *X-Z Cut Visualizer* (**figura I.57-a**), y ahí se selecciona una posición de la que se quiere hacer la transformada en campo lejano.

A continuación se selecciona del menú *Tools* la opción *Far Field* (**figura I.57-a**), abriéndose así una ventana llamada *Wide Angle Far Field Calculation* (**figura I.57-b**), donde se indican las características de la simulación, y se pulsa *Calculate*. Se genera un archivo \*.f2d que se abre con el *Optiwave 2D Viewer* donde se mostrará el cálculo de la transformada en campo lejano deseada.



a) Selección Far Field del menú Tools



b) Wide Angle Far Field Calculation

Figura I. 57 Cálculo de Campo Lejano para simulaciones 2D



Bibliografía del Anexo I. OptiFDTD 8.0.

[I.1] “OptiFDTD 8.0. Technical Background and Tutorials”, Optiwave.

[I.2] “OptiFDTD 8.0. User’s Reference”, Optiwave.

[I.3] “Introduction to Fourier Optics”, Joseph W. Goodman.

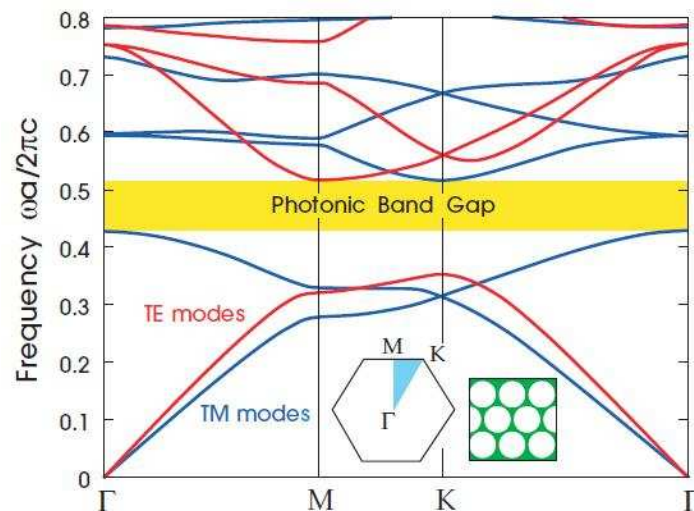


## [Anexo II. Band Solver]



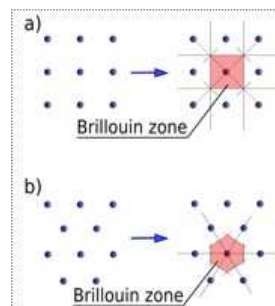
En este anexo se ha desarrollado una breve descripción de las dos herramientas que provee el paquete software **OptiFDTD 8.0** para el cálculo de los diagramas de bandas. Un diagrama de bandas representa los modos permitidos para la transmisión en un cristal fotónico. Como puede verse en la **figura II.1**, el eje vertical representa la frecuencia normalizada, donde  $a$  es la constante de red del cristal fotónico, mientras que en el eje horizontal se representan los vectores de onda  $k_x$ ,  $k_y$  y  $k_z$ , mostrando los modos que pueden transmitirse en según qué direcciones. Los diagramas de bandas suelen mostrar los modos transmitidos para la polarización TE y TM, dándose también casos en los que se representan modos pares e impares.

La utilidad más importante de estos diagramas consiste en que muestran rangos de frecuencias en los **que no está permitida la transmisión de ningún modo**, es el llamado Photonic Band Gap o Gap Fotónico, y que a lo largo de este trabajo se ha llamado simplemente gap. En la **figura II.1** se muestra un gap abierto para una celosía hexagonal de agujeros de aire sobre un sustrato de índice de refracción de 3.6, en el que se abre un gap tanto en modos TE como en TM (algo difícil de conseguir).



**Figura II. 1** Diagrama de bandas de una celosía hexagonal de agujeros de aire sobre un sustrato de índice de refracción de 3.6, obtenido de [II.1]

En las estructuras periódicas se le llama zona de Brillouin a la celda básica de periodicidad de un cristal fotónico. La periodización de esta celda es la que forma el cristal fotónico y puede verse estas zonas para 2D en la **figura II.2**.



**Figura II. 2** Zonas irreducibles de Brillouin para estructuras bidimensionales a) cuadrada y b) hexagonal.

A continuación se describirá el fundamento teórico de dos métodos distintos para resolver diagramas de bandas. También se hará un pequeño resumen de las opciones del programa. Hay que destacar que estos métodos para resolver los diagramas de bandas mostrados a continuación sólo se pueden emplear cuando tenemos una estructura periódica creada con la herramienta *PBG Crystal Structure*.

## II.1 PWE Band Solver.

El *Plane Wave Expansion (PWE) Method* hace referencia a una técnica computacional en electromagnetismo para resolver las ecuaciones de Maxwell mediante la formulación de un problema de valores propios de la ecuación [II.1].

La ecuación de Maxwell en un medio transparente, tiempo-invariante, sin fuentes y no magnético puede escribirse de la siguiente forma:

$$\nabla \times \frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \nabla \times \vec{H}(\vec{r}) = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{H}(\vec{r})$$

Donde  $\varepsilon(\vec{r})$  es la función dieléctrica dependiente del espacio,  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío, y  $\vec{H}(\vec{r})$  es el vector de campo magnético de una frecuencia definida,  $\omega$ , con dependencia temporal,  $e^{i\omega t}$ . Esta ecuación representa un problema Hermitiano de valor propio.

Según el teorema de Bloch sobre las condiciones de contorno debido a la periodicidad infinita, el campo magnético adopta la siguiente forma (valores complejos):

$$\vec{H}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} \vec{h}_k(\vec{r})$$

Donde  $\vec{h}(\vec{r}) = \vec{h}(\vec{r} + \vec{R})$  para todas las combinaciones de  $\vec{R}$ . Se obtiene la ecuación de Maxwell con la siguiente forma:

$$(\nabla + i\vec{k}) \times \left\{ \frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} (\nabla + i\vec{k}) \right\} \times \vec{h}_k = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{h}_k$$

Esta es la ecuación fundamental que necesita ser resuelta. La ecuación se ha transformado en un problema finito por la expansión del campo magnético sobre una base finita de ondas planas simples. El resultado de resolver el problema discreto es la relación de la dispersión entre las frecuencias de los modos y el vector de onda  $\vec{k}$ , normalmente mostradas como los diagramas de bandas vistos en la **figura II.1**.

### II.1.1 Parámetros.

Para inicializar el *PWE Band Solver* se necesita tener en el layout una estructura periódica de una, dos o tres dimensiones y una fuente de luz (Input Plane). Para entrar en la ventana de parámetros PWE (PWE Parameters dialog box), hay que entrar desde la barra de herramientas, Simulation > PWE Band Solver Parameters (ver **figura II.3**)

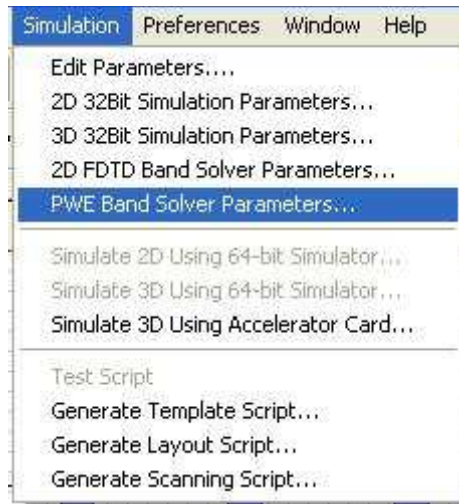


Figura II. 3 Acceso al PWE Band Solver Parameters

Una vez abierta se pueden introducir los parámetros deseados para la obtención del diagrama de bandas. En la **figura II.4** se muestra la ventana.

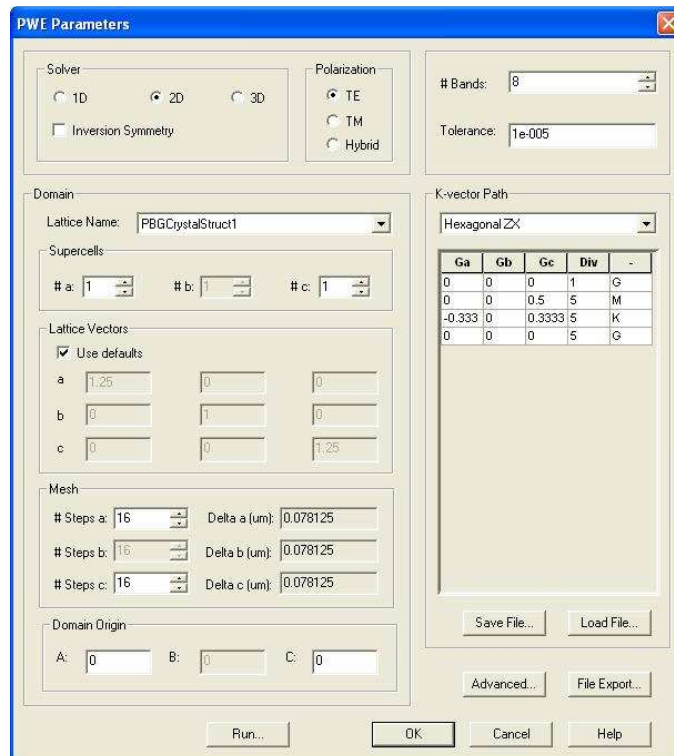


Figura II. 4 Ventana PWE Parameters

Como puede verse, hay muchas opciones para modificar en esta ventana, a continuación se hará una breve descripción de cada uno de ellos:

- **Solver Group.**

- a. Solver.

En esta opción se debe seleccionar el tipo de periodicidad que tiene el cristal fotónico, 1D (red de difracción de Bragg), 2D o 3D. La pestaña *Inversion Symmetry* está relacionada con las simetrías de la *Supercell*, para acelerar los cálculos de los valores propios.

- b. Polarization.

Se selecciona TE o TM para sacar los modos transmitidos en ambas polarizaciones, esta selección solo es posible para estructuras 1D y 2D, pero no se puede seleccionar para estructuras 3D. En el caso 3D sólo se puede seleccionar la polarización híbrida, también disponible en 1D y 2D.

- **Domain Group**

- a. Lattice Name.

Se selecciona el nombre de la estructura sobre la que se realiza el cálculo de las bandas.

- b. Supercells.

Determina el tamaño tomado para la simulación, por lo general se toma como tamaño una zona irreducible de Brillouin (1,1,1).

- c. Lattice Vectors.

Se pueden modificar los vectores de la celosía según los ejes **a**, **b** y **c**. El vector **a** se corresponde con el **eje x** (en una celosía hexagonal se verá modificado), el **b** se corresponde con el **eje y**, en este caso sería la altura, puesto que el **c** se corresponde con el **eje z**, en el sentido de la propagación, generalmente. En este apartado se incluye la opción de usar los vectores por defecto, en el que el programa los calcula según la estructura que sea.

- d. Mesh.

Se indica el número de pasos espaciales para la simulación en función de los ejes. Por lo general se toma una potencia de dos aunque no tiene porqué, y al lado de número de pasos se muestra el paso espacial en  $\mu\text{m}$ .

- e. Domain Origin.

El *Domain Origin* es el origen del dominio numérico expresado en términos de los vectores A, B y C. Por defecto, el *Domain Origin* coincide con el origen de la celosía.

- **Bands Group**

- a. # Bands.

Numero de modos que se calculan.

- b. Tolerance.

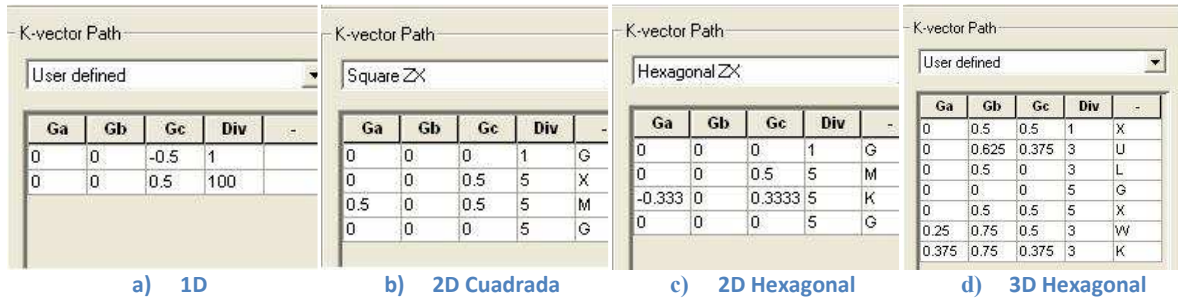
Error máximo tolerado.

- **K-vector Path Group**

Para realizar los cálculos de las bandas se necesita tener un camino de vectores-K. Por defecto este camino no está especificado, y es diferente según la

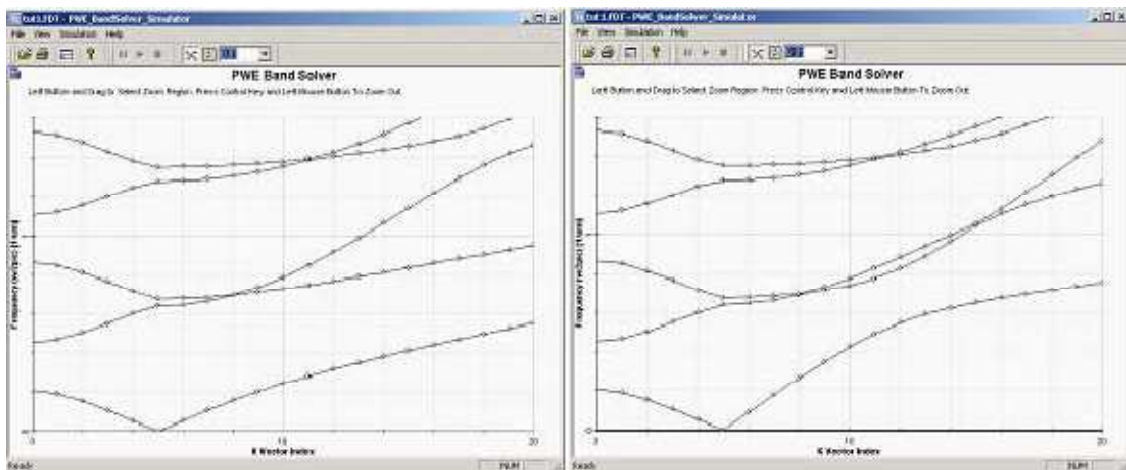


estructura del cristal fotónico. Los únicos caminos especificados son los de la celosía cuadrada y hexagonal sobre el plano XZ, ambos en 2D, estructuras 1D o 3D deben ser editadas por el usuario seleccionando la opción *User Defined* del menú desplegable. En la **figura II.5** se muestran varios ejemplos de este apartado.



**Figura II. 5** Se muestran distintos caminos para el cálculo de bandas para distintas celosías, a) para el caso unidimensional, b) para la celosía cuadrada bidimensional, c) para el caso de la celosía hexagonal bidimensional y d) para el caso de una celosía hexagonal en tres dimensiones.

Para el caso unidimensional, se escoge la dirección de propagación normal a las capas de material dieléctrico, en este caso se puede seleccionar el modo de propagación off-axis, tal que la primera parte del diagrama de bandas muestra la propagación en el eje z, mientras que la segunda parte muestra la propagación en el eje y, paralelo a las columnas de dieléctrico. En el caso de la **figura II.5** se observa como la primera parte (5 puntos) coincide el modo TE y TM (mostrando que los modos TE y TM son degenerados), mientras que la parte de la derecha de los diagramas son diferentes en un caso y en otro. Los vectores utilizados son  $(0.0, 0.0, -0.5)$ -div = 1,  $(0.0, 0.0, 0.0)$ -div = 5 y  $(0.0, 1.5, 0.0)$ -div = 15.



**Figura II. 6**

Este método también permite localizar modos que puedan quedar confinados en alguna cavidad debida a algún defecto en una estructura. A continuación se verá el ejemplo del análisis de un defecto en una celosía cuadrada 2D.

## II.1.2 Análisis de defectos 2D en Cristales Fotónicos.

Este ejemplo se encuentra en [II.2], lección 14. Se trata de una celosía cuadrada 9x9 bidimensional de pilares de dieléctrico cuyo índice de refracción es 2.98 rodeados de aire. La constante de red  $a = 1\mu\text{m}$  y el radio de los pilares  $r = 0.2a$ . El defecto se sitúa en mitad de la malla, en la que falta un pilar.

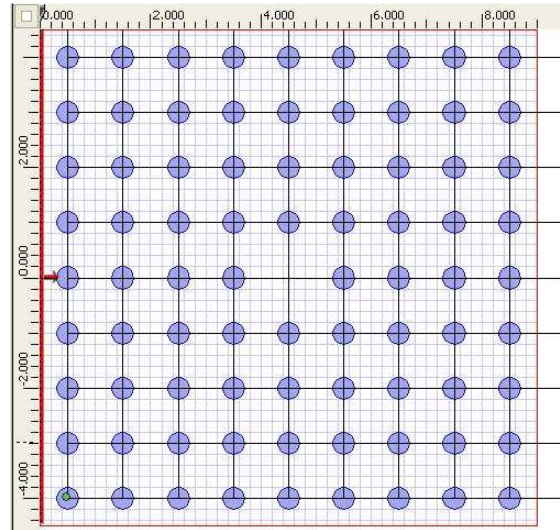


Figura II. 7 Celosía cuadrada 2D con defecto en el centro de la misma.

Para conocer el efecto del defecto en los modos guiados se debe tomar tamaño de *Supercell* de forma que abarque el defecto sin romper la simetría. En este caso, se definirá una *Supercell* de 5x5, cuyo origen este situado en la posición (1.5, 0.0, 1.5), área sombreada interior de la **figura II.7**, mientras que el área sombreada exterior de la misma figura, de 6x6, en la que los pilares caen en el límite exterior, es igualmente válida para el cálculo de modos. En este caso se podría usar la pestaña Inversion Symmetry para acelerar los cálculos.

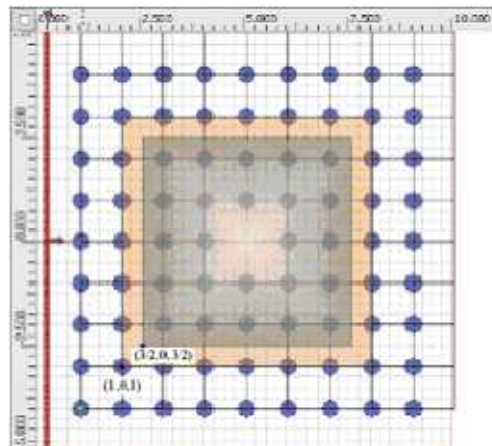


Figura II. 8

La simulación se hace con los siguientes parámetros resumidos en la ventana mostrada en la **figura II.9**.

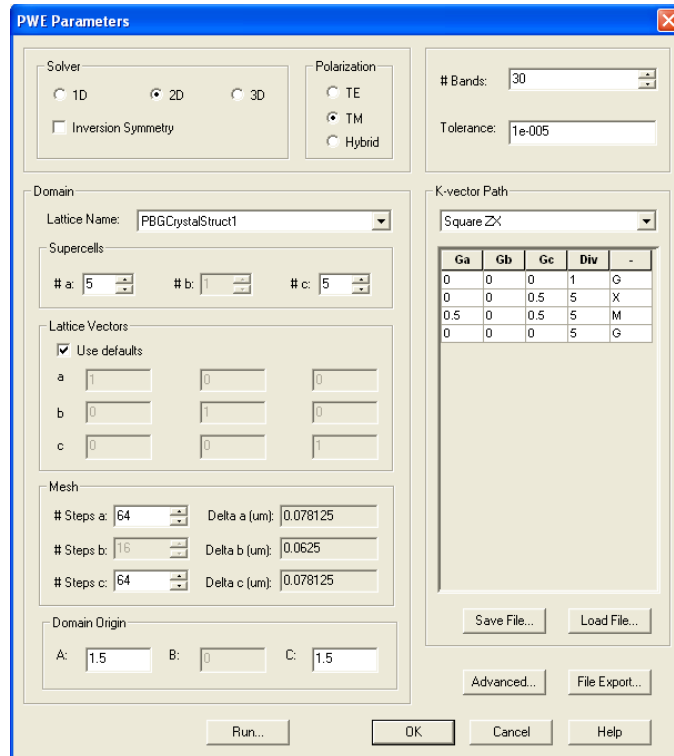


Figura II. 9

El alto número de pasos y de bandas escogidas es necesario porque para observar algún efecto causado por el defecto de la estructura. La simple comparación visual entre el diagrama de bandas de la estructura sin defecto sobre una zona irreducible de Brillouin y del diagrama de bandas de la estructura con el defecto será suficiente para localizar modos atrapados en ese defecto, tal y como muestra la **figura II.10**. Ese modo resonará en el defecto.

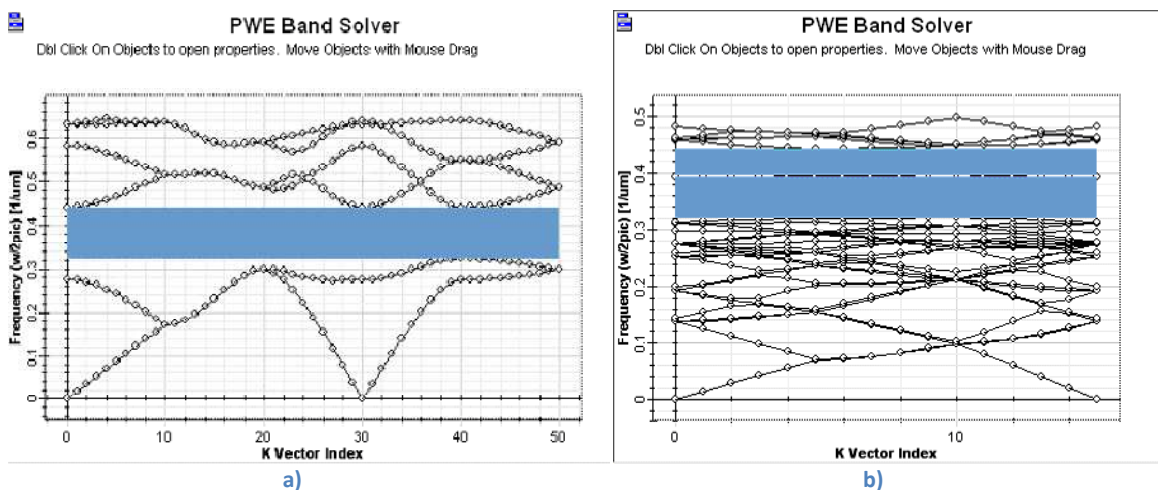


Figura II. 10 a) Gap generado por la celosía hexagonal 2D de pilares de dieléctricos, y b) modo generado en el gap generado por la inclusión de un defecto.

## II.2 2D FDTD Band Solver.

El método empleado por la herramienta *2D FDTD Band Solver* se basa, como su propio nombre indica, en las simulaciones FDTD [II.2]. Esta herramienta es mucho menos potente que la *PWE Band Solver*, y es más compleja de usar. Para extraer los modos con el método FDTD hacen falta dos cosas:

- Poner unos parámetros iniciales razonables para poder excitar todos los modos.
- Obtener los valores propios (frecuencias) del espectro de Fourier de la secuencia temporal obtenida en distintos puntos de la celosía periódica.

La obtención de resultados globales obtenidos con distintas células básicas manejadas con este método se consigue aplicando las condiciones de contorno de Bloch. Pero de todas formas no se puede garantizar que todos los modos sean excitados, por lo que la fiabilidad del método no es total.

Las ecuaciones básicas para la simulación 2D FDTD se muestran a continuación en la **tabla II.1**:

TE	TM
$\mu_0 \frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{\partial E_y}{\partial z}$	$\mu_0 \frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z}$
$\mu_0 \frac{\partial H_z}{\partial t} = -\frac{\partial E_y}{\partial x}$	$\varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma E_x = -\frac{\partial H_y}{\partial z}$
$\varepsilon \frac{\partial E_y}{\partial t} + \sigma E_y = \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x}$	$\mu_0 \frac{\partial E_z}{\partial t} + \sigma E_z = \frac{\partial H_y}{\partial x}$

Tabla II. 1 Ecuaciones básicas para el cálculo FDTD

Estas ecuaciones son las mismas que se utilizan en las simulaciones convencionales, pero del mismo modo que pasa con el método PWE, al utilizar la condición de contorno de Bloch, todas las componentes del campo utilizadas en el cálculo de las bandas son valores complejos.

Como último punto, destacar que este método sólo soporta celosías cuadradas y hexagonales en 2D.

### II.2.1 Parámetros.

Para inicializar el *2D FDTD Band Solver* se necesita tener en el layout una estructura periódica de dos dimensiones, al contrario que con el PWE Band Solver no es necesario tener una fuente de luz (Input Plane). Para entrar en la ventana de parámetros 2D FDTD (2D FDTD Band Solver Parameters dialog box), hay que entrar desde la barra de herramientas, *Simulation* > *2D FDTD Band Solver Parameters* (ver **figura II.2**, encima de la selección sombreada).

Una vez abierta la ventana se puede proceder a modificar los distintos parámetros de la simulación para calcular bandas. Este Band Solver existía ya en anteriores versiones del OptiFDTD para calcular las bandas, y es menos potente que el PWE Band Solver.

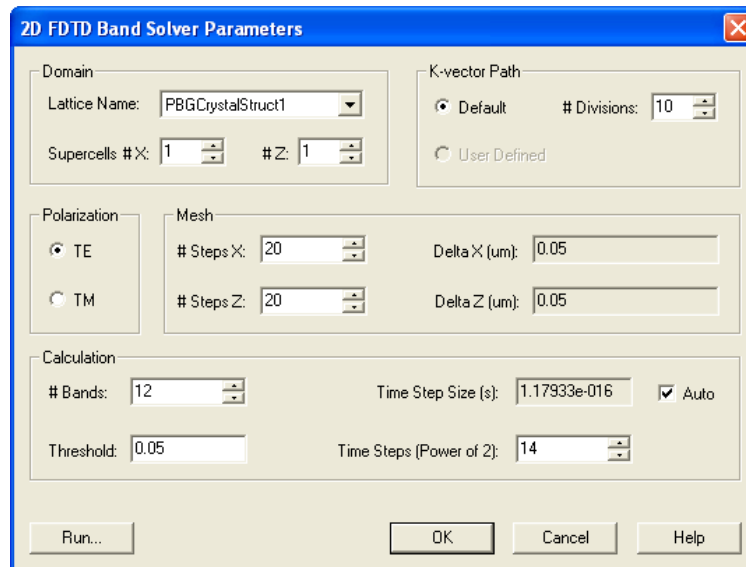


Figura II. 11 Ventana 2D FDTD Band Solver Parameters

A continuación se hará una breve descripción de los campos que se pueden modificar en la ventana de la **figura II.11**:

- **Domain Group**

- a. Lattice Name.  
Se selecciona el nombre de la estructura sobre la que se realiza el cálculo de las bandas.
- b. Supercells.  
Determina el tamaño tomado para la simulación, por lo general se toma como tamaño una zona irreducible de Brillouin (1, 1).
- c. Mesh.  
Se indica el número de pasos espaciales para la simulación en función de los ejes **x** y **z**. Al lado del número de pasos se muestra el paso espacial en  $\mu\text{m}$ .
- d. Polarization.  
Se selecciona polarización TE o TM.

- **Calculation Group**

- a. # Bands.  
Numero de modos que se calculan.
- b. Threshold.  
Los valores propios se obtienen del espectro, cuyo valor de pico esta normalizado a la unidad. Si los valores de los subpicos obtenidos son menores que este threshold, entonces no serán considerados como un modo.
- c. Time Step size (s).  
Es el intervalo temporal para la simulación FDTD. Hay una pestaña para que se calcule automáticamente.

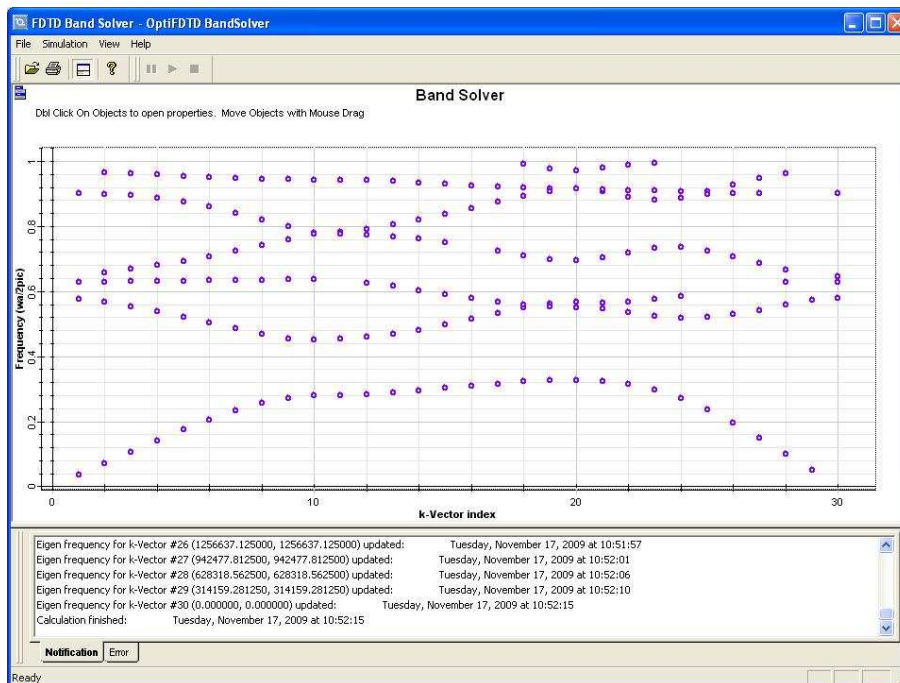
d. Time Steps (Power of 2).

Puesto que se utiliza el algoritmo FFT para hallar el espectro, una potencia de dos en el número de pasos es necesaria para optimizar los cálculos.

- **K-vector Path Group**

En este simulador no se puede seleccionar ningún K-vector Path, únicamente se puede seleccionar el número de divisiones. Este simulador, como se ha mencionado anteriormente, está preparado para resolver diagramas de bandas en 2D de celosía cuadrada o hexagonal. No está preparado para cristales fotónicos unidimensionales ni tridimensionales.

Los resultados de los cálculos de bandas se muestran en un diagrama de bandas normal, **figura II.12**, como el del PWE Band Solver, pero en este caso no se pueden unir con una línea los puntos obtenidos, y no localiza los gaps automáticamente.



**Figura II. 12 Diagrama de bandas obtenido con el 2D FDTD Band Solver**

Como último punto, se debe comentar que el 2D FDTD Band Solver genera un archivo con los resultados con una extensión \*.bnd que puede abrirse con esta misma herramienta.

### Bibliografía del Anexo II. Band Solver:

[II.1] “Photonic crystals. Molding the flow of light”, John D. Joannopoulos, Steven G. Johnson, Joshua N. Winn, Robert D. Meade.

[II.2] “OptiFDTD 8.0. Technical Background and Tutorials”, Optiwave.





## [Anexo III. VB Script]



En este anexo se ha preparado una breve descripción de la interfaz *Visual Basic (VB) Script* que provee el paquete software **OptiFDTD 8.0**. El **OptiFDTD Analyzer** ya provee todas las herramientas necesarias para el análisis de los resultados post simulación, pero estas herramientas deben ser utilizadas manualmente por el usuario. El VB Script da la oportunidad de automatizar el procesamiento de los resultados de las simulaciones y generar layouts automáticamente, entre otras opciones [III.1].

Se pueden crear scripts manualmente escribiendo el script en la ventana Scripting del **OptiFDTD Designer**, en las pestañas de selección de ventanas, ver **figura III.1**, o generar scripts automáticamente usando una combinación de las Scripting Tools (Herramientas Scripting), o también generando un script automáticamente y modificándolo luego manualmente.

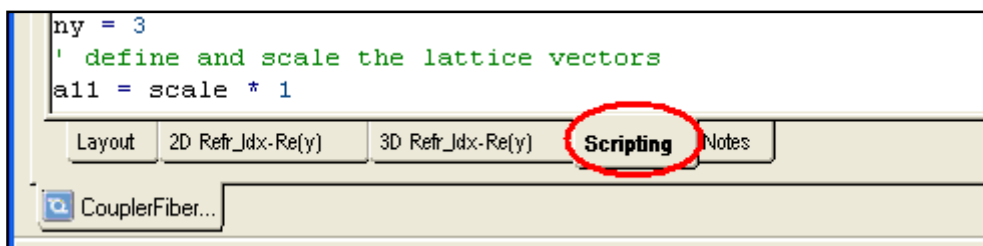


Figura III. 1 Pestaña de acceso a la ventana Scripting

Es común generar una estructura compleja mediante scripting, pero que luego no se necesite realizar la simulación mediante este método. Es por esto que para realizar simulaciones mediante scripting se debe seleccionar la pestaña “*Simulate Using Script*” como puede verse en la **figura III.2** indicada con una elipse roja.

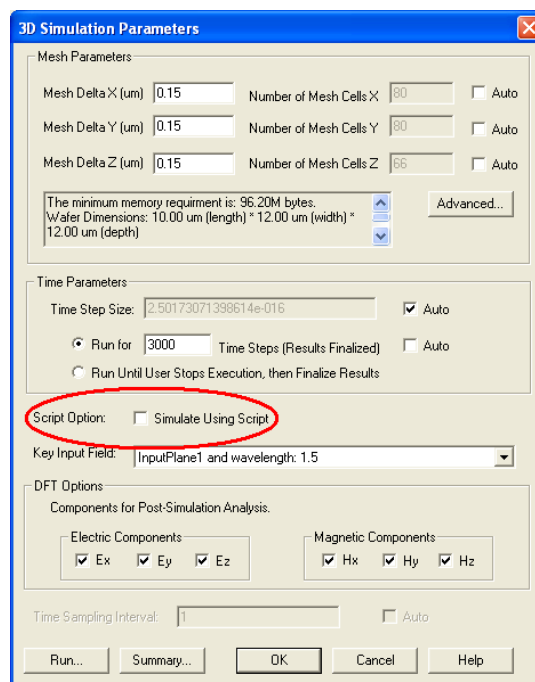


Figura III. 2 Pestaña Simulate Using Script

Al seleccionar esta pestaña hay que asegurarse de que la llamada **ParamMgr.Simulate** debe estar en alguna parte en el script, puesto que es la llamada para la ejecución de una simulación.

Según las necesidades de cada uno, puede ser beneficioso crear un bucle y realizar una llamada a la simulación una vez que todos los cambios en el layout estén completados. Cada vez que **ParamMgr.Simulate** es llamada, se ejecuta una simulación del layout que hay en ese momento. Mientras la simulación se ejecuta, el script se pausa y se para de ejecutar cambios en el layout para mantener el estado que debería tener para la simulación. El simulador crea un archivo de resultados con un número entero añadido a él que especifica la iteración en la que se ha realizado la simulación, empezando de uno, se incrementa cada vez que el método de simulación es llamado.

El **OptiFDTD Designer**, el **OptiFDTD Simulator** y el **OptiFDTD Analyzer** pueden ejecutar scripts, pero el comportamiento del script en cada aplicación es diferente. El script ejecutado por el Designer usa llamadas a **Simulate API** (Interfaz de Programación de Aplicaciones, [III.1]) para actualizar la geometría del layout, permitiendo de este modo observar los cambios realizados en el layout por el script. Los scripts ejecutados por el Simulator debe tener al menos una llamada a la acción **Simulate** (puede verse como **ParamMgr.Simulate** al principio de esta página) para que tengan efecto en las simulaciones. Cuando el script es ejecutado en el Analyzer, las llamadas a simular se reemplazan con una llamada que incrementa un contador de iteraciones interno. Esto permite al Analyzer reproducir el layout y los parámetros de la simulación para una iteración particular.

### III.1 Scripting Tools

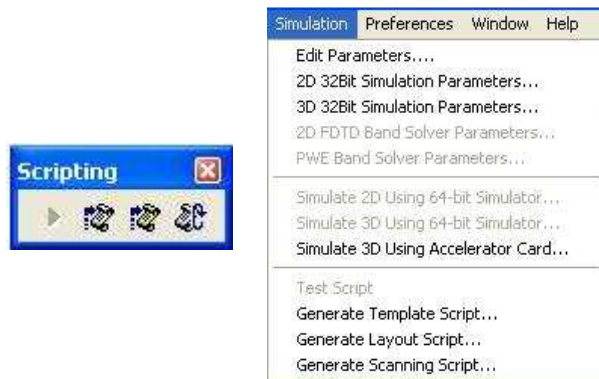


Figura III. 3 Menú directo a las Scripting Tools

Las Scripting Tools consisten en tres herramientas utilizadas para generar scripts, **figura III.3**. Las herramientas son el Template Script, el Layout Script, y el Scanning Script, y son un buen punto de partida para una mayor complejidad de scripts. Es una buena forma de familiarizarse con el interfaz de VB Script, y con las propiedades de los elementos que conforman un layout. Con estas herramientas se pueden poner los elementos deseados en el layout (guías, cristal fotónico, input fields, etc.) y generar un script de lo que se tiene en ese momento en el layout.

### a) Template Script

Una vez se tienen todos los elementos deseados en el layout, puestos manualmente, al pulsar sobre el botón *Generate Template Script...* se genera un script que es la representación exacta del diseño. Las etiquetas de los elementos (labels, ver **Anexo I. OptiFDTD 8.0**) son generadas dinámicamente, por lo que este script se puede ejecutar repetidamente, creando una función de tipo copiar-pegar.

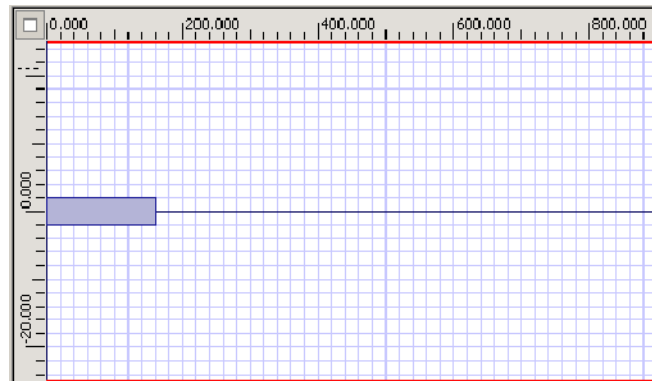


Figura III. 4

Considerando el layout de la **figura III.4**, al generar el Template script automáticamente el siguiente VB script:

```
Dim Linear1
Set Linear1 = WGMgr.CreateObj ( "WGLinear", WGMgr.FindID ("Linear") )
Linear1.SetPosition -28, 9.2, 424, 9.2
Linear1.SetAttr "WidthExpr", "4.0"
Linear1.SetProfileName "ChannelPro1"
```

El WGMgr.FindID ("Linear") crea ID dinámicos (etiquetas) que recoge un string de entrada, en este caso "Linear", y devuelve el mismo string, pero al que se le ha añadido un número entero. De esta forma la etiqueta generada con este método es única.

### b) Layout Script

El Layout Script funciona del mismo modo que el Template Script, al pulsar el botón *Generate Layout Script...* se genera una representación exacta del diseño. En este caso en cambio, las etiquetas de identificación de los objetos no son creadas dinámicamente, si no que los objetos mantienen las etiquetas asignadas en el layout, sin cambiar nada.

Considerando el layout de la **figura III.4**, se obtiene el siguiente VB script:

```
WGMgr.DeleteAll
InputPlaneMgr.DeleteAll

Dim Linear1
Set Linear1 = WGMgr.CreateObj ( "WGLinear", "Linear1" )
Linear1.SetPosition -28, 9.2, 424, 9.2
Linear1.SetAttr "WidthExpr", "4.0"
Linear1.SetProfileName "ChannelPro1"
```

Como se puede observar, en este caso se añaden dos instrucciones al principio del script, **WGMgr.DeleteAll** e **InputPlaneMgr.DeleteAll**. La instrucción DeleteAll ejecutada por el Waveguide Manager y por el Input Plane Manager limpia el script de todas los elementos y fuentes de luz que haya anteriormente a la ejecución (si se ejecuta más de una vez el script). Esto se hace porque las etiquetas ya existen en el layout y son únicas, por lo que hay que limpiar el layout para que no se repitan.

### c) Scanning Script

El Scanning Script se usa principalmente para escanear parámetros, de forma que se pueden escanear parámetros y manipular guías de onda en un mismo script. Para utilizar el scanning script es necesario crear un parámetro o una variable, por ejemplo, que se llame “ParamWidth” (Ver **Anexo I. OptiFDTD 8.0**) y que designe la anchura de varias guías en un layout. Cuando se ejecute el scanning script, se puede modificar el parámetro de la anchura, o la posición de la guía, o lo que se desee.

Al pulsar el botón *Generate Scanning Script...* siempre se genera el mismo script:

```
Const NumIterations = 1  
  
For x = 1 to NumIterations  
    ParamMgr.Simulate  
    WGMgr.Sleep( 50 )  
Next
```

Para escanear scripts, lo primero hay que definir un parámetro en el layout, como se ha mencionado anteriormente. Posteriormente, en el script, hay que llamar a la función **ParamMgr.SetParam “Param”, ValorParam**, para modificar el parámetro definido al valor deseado.

Una vez se han comentado los distintos tipos de scripts que se pueden llevar a cabo en el OptiFDTD, se mostrarán a continuación varios ejemplos realizados mediante scripts, en cuanto a generar un layout completamente, modificar un script para añadirle algún elemento, o para el postproceso de datos automáticamente.

### Ejemplo de Coupler fiber to phcfiber

En este ejemplo se muestra el modo de crear un acoplador de fibra monomodo a una fibra de cristal fotónico para observar las pérdidas de inserción.

Se elimina todo lo que pudiera haber antes en el layout:

```
WGMgr.DeleteAll
ObservePtMgr.DeleteAll
InputPlaneMgr.DeleteAll
```

Se declaran las variables necesarias:

```
Dim Linear3
Dim tag, scale
Dim x0, y0
Dim zstart
Dim nRow1, nRow2, nRow3
Dim nx, ny
```

Se declaran también las variables y se le dan valores para crear la fibra de cristal fotónico. Se definen los vectores de la celosía, el tamaño, la posición central y la posición inicial en z:

```
dim a11, a12
dim a21, a22
' constant de red
scale = 1.8
' tamaño de la celosía
nx = 4
ny = 3
' vectores de la celosia escalados
a11 = scale * 1
a12 = 0

a21 = scale * 0.5
a22 = scale * (sqr(3)/2)

' posición central
x0 = 0.0
y0 = 0.0

' comienzo de la fibra de cristal fotónico
zstart = 2.0
```

Ahora se definen las características de la fibra monomodo SMF28. Es necesario declarar el perfil *Fiber3* en el *Profile Designer*, ver **Anexo I. OptiFDTD 8.0**.

```
Dim Linear1
Set Linear1 = WGMgr.CreateObj ( "WGLinear", "Linear00" )
Linear1.SetPosition 0, 0, zstart, 0
Linear1.SetAttr "WidthExpr", "20"
Linear1.SetAttr "Depth", "0"
Linear1.SetAttr "StartThickness", "6.000000"
Linear1.SetAttr "EndThickness", "6.000000"
Linear1.SetProfileName "Fiber3"
Linear1.SetDefaultThicknessTaperMode True
```

Ahora se realiza un bucle para generar el perfil de la fibra de cristal fotónico. Las etiquetas se generan mediante el uso de **CStr(tag)** cuya función es la de añadir al string **“Linear”** un apéndice numérico llamado *tag*, y que convertirá a cada guía en un agujero de la fibra de cristal fotónico. La posición de cada una de estas guías se calcula mediante el uso de las variables *ii* y *jj* multiplicadas por el vector de la celosía.

En este caso también es necesario declarar el perfil *Fiber1* y *Fiber2* con el *Profile Designer* antes de ejecutar el script.

```
' Primera fila
for ii = -ny to ny
  for jj = -nx to nx
    tag = (ii+ny)*2*nx + (jj+nx)
    MsgBox( CStr(tag) )
    Set Linear3 = WGMgr.CreateObj ( "WGLinear", "Linear"+CStr(tag) )
    Linear3.SetPosition zstart, x0+jj*a11, 10, x0+jj*a11
    Linear3.SetAttr "WidthExpr", "0.5"
    Linear3.SetAttr "Depth", CStr(y0+2*ii*a22)
    Linear3.SetAttr "StartThickness", "6.000000"
    Linear3.SetAttr "EndThickness", "6.000000"
    if ( ii=0 And jj=0 )then
      Linear3.SetProfileName "Fiber1"
    else
      Linear3.SetProfileName "Fiber2"
    end if
    Linear3.SetDefaultThicknessTaperMode True

    tag = 100 + (ii+ny)*2*nx + (jj+nx)
    Set Linear3 = WGMgr.CreateObj ( "WGLinear", "Linear"+CStr(tag) )
    Linear3.SetPosition zstart, x0+a21+jj*a11, 10, x0+a21+jj*a11
    Linear3.SetAttr "WidthExpr", "0.5"
    Linear3.SetAttr "Depth", CStr(y0+a22+2*ii*a22)
    Linear3.SetAttr "StartThickness", "6.000000"
    Linear3.SetAttr "EndThickness", "6.000000"
    Linear3.SetProfileName "Fiber2"
    Linear3.SetDefaultThicknessTaperMode True
  next
next
```

Por último se declaran la fuente de luz, con sus características y con las propiedades en 2D y en 3D.

```
Dim InputPlane1
Set InputPlane1 = InputPlaneMgr.CreateInputObj ( "Continuous", "Gaussian",
"InputPlane1", "Vertical" )
'Datos comunes para 2D y 3D.
InputPlane1.SetPosition 0.21
InputPlane1.SetDirection "Forward"
InputPlane1.SetWaveLength "1.5"
InputPlane1.SetEnabled True
'Datos para 2D.
InputPlane1.SetAmplitudeOrPower "Amplitude", "1.0"
InputPlane1.SetRefLocal
InputPlane1.SetCenterPos "0.0"
InputPlane1.SetHalfWidth "0.5"
InputPlane1.SetTiltingAngle "0"
'Datos para 3D.
InputPlane1.SetAmplitudeExpr3D "1.0"
InputPlane1.SetRefLocal3D
```



```
InputPlane1.SetCenterPosExpr3D "0.0", "0.0"
InputPlane1.SetHalfWidthExpr3D "0.5", "0.5"
InputPlane1.SetTiltingAngleExpr3D "0"
InputPlane1.SetLYPolarization3D
InputPlane1.RefreshInputField
```

La ejecución de este script, pulsando el botón *Test Script* que aparece en la **figura III.3**, genera el layout de la **figura III.5**.

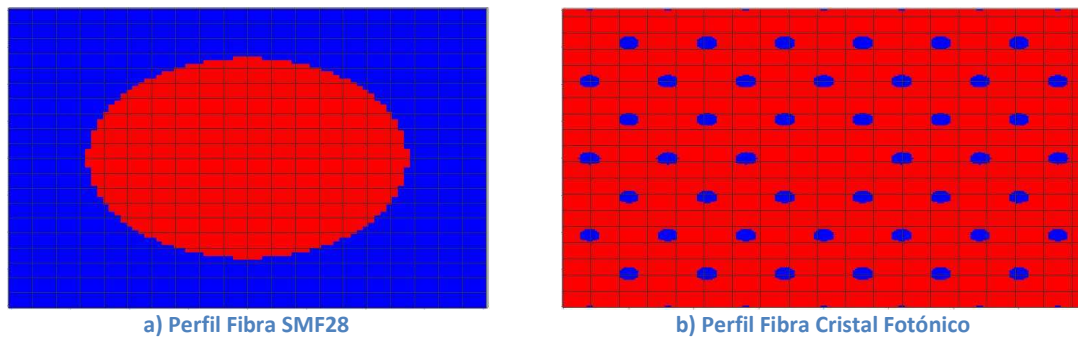


Figura III. 5 Perfiles generados en dos puntos del eje z con el script CouplerFiberToPhCFiber

### Ejemplo para crear bolas aleatorias de metal

En este ejemplo se ha preparado una manera para colocar pequeñas bolas de metal de manera aleatoria sobre los espacios entre las columnas de la red de difracción de los capítulos 3 y 4. Para ello es necesario utilizar la función **Randomize**, para que la semilla de la función aleatoria cambie de una ejecución a otra, y también utilizar la función **CStr(Variable)**, con el fin de designar a cada bola una etiqueta independiente las unas de las otras. Este bucle genera las bolas en un plano XY para una posición z determinada, pero esto puede hacerse aleatoriamente sin mayor problema si se desea.

Se declaran las variables a utilizar en el bucle:

```
Dim PBGCrystalStruct1
Dim CellAtom_PBGCrystalStruct
Dim n
Dim H
n = 100
```

Se inicia el bucle, en este caso H representa los huecos entre las columnas, de -4 a 4, puesto que la mitad están situados para  $x < 0$ , y n corresponde al número de bolas de metal que se van a introducir en cada hueco. Como se ha comentado antes, es necesario generar etiquetas diferentes para cada bola creada. Se crea mediante la opción de crear cristales fotónicos cuyos elementos sean esferas, no se consiguió hacerlo directamente con esferas de metal, puesto que el posicionamiento no se podía realizar de la forma deseada.

```
for H = -4 to 4
  for nn = 0 to n
    Set PBGCrystalStruct1 = WGMgr.CreateObj (
      "WGPBGCrystalStruct", "PBGCrystalStruct" + "_" + CStr(H) + "_" +
      CStr(nn) )

    Randomize
```

```
PBGCrystalStruct1.SetStart 1.78, (H*1.25)+(0.5-rnd)
PBGCrystalStruct1.SetAttr "Depth", "0"
PBGCrystalStruct1.SetRotateAngleYExpr "0.0"
PBGCrystalStruct1.SetLatticeType "3D RECTANGULAR"
PBGCrystalStruct1.SetLatticeFill "BLOCK"
PBGCrystalStruct1.SetLatticeScaleExpr "0.1"
PBGCrystalStruct1.SetCountA 1
PBGCrystalStruct1.SetCountB 1
PBGCrystalStruct1.SetCountC 1
PBGCrystalStruct1.SetCurrentEditLayer 0
```

Se definen las esferas de metal, y se sitúa en la posición y aleatoria.

```
Set CellAtom_PBGCrystalStruct1 =
PBGCrystalStruct1.AddAtomToUnitCell ("WG3DSPHERE")

CellAtom_PBGCrystalStruct1.SetPositionExpr "", "", ""
CellAtom_PBGCrystalStruct1.SetPosition 0, 6*rnd, 0

CellAtom_PBGCrystalStruct1.SetOrientationExpr "", "", ""
CellAtom_PBGCrystalStruct1.SetOrientationOffset 0, 0, 0
CellAtom_PBGCrystalStruct1.SetMaterial
"Silver_Ag_Lorentz_Drude_Model"
CellAtom_PBGCrystalStruct1.SetRadiusExpr "0.01"

PBGCrystalStruct1.ResetAllToUnitCell
PBGCrystalStruct1.ResetUnmodifiedCellsToUnitCell
```

```
next
next
```

La inclusión de este script en el de la red de difracción y su ejecución genera un layout como el de la **figura III.6**, en  $z = 1.8\mu\text{m}$ , en este caso las bolas tienen un diámetro de 20nm.

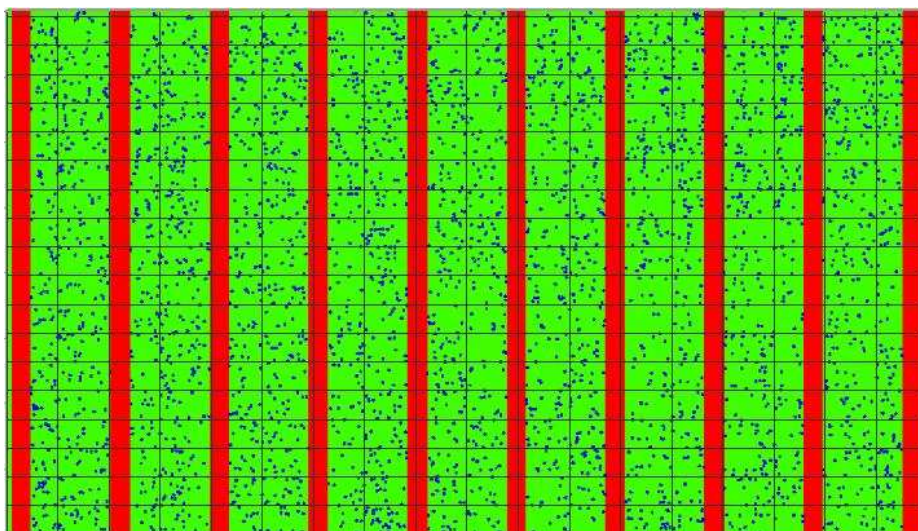


Figura III. 6 Red de difracción con bolas aleatorias de metal

### Ejemplo Power Transmittance

El ejemplo de Power Transmittance que se muestra a continuación se ha sacado de [III.2], es concretamente el tutorial llamado: “*Lesson16 – Calculating Power Transmittance and Reflection using VB Script*”, del que el programa ya traía un diseño en OptiFDTD con el siguiente script. El script del layout estaba situado antes que el siguiente script, pero esta es la parte que realiza el cálculo de la potencia transmitida y reflejada. Se muestra tal cual está en el diseño del OptiFDTD, sin ninguna modificación. Si se quiere una descripción más exhaustiva del funcionamiento del mismo, ver [III.2], Lesson 16, en la página 335.

El script genera cuatro archivos \*.txt de potencia transmitida, reflejada y ambas normalizadas con respecto a la fuente de luz.

#### ParamMgr.Simulate

```

Call Sub_CalcPowerSpectrum("ObservationLine1", x, true, 1.40,1.70, 101)
Call Sub_CalcNormalizedPowerSpectrum("ObservationLine1", x, true, 1.40,
1.70, 101, "InputPlane1")
Call Sub_PowerAtCenterWavelength("ObservationLine1", x, true)
Call Sub_PowerAtWavelength(1.5, "ObservationLine1", x, true)

Call Sub_CalcPowerSpectrum("ObservationLine2", x, True, 1.40,1.70, 101)
Call Sub_CalcNormalizedPowerSpectrum("ObservationLine2", x, True,
1.40,1.70, 101, "InputPlane1")
Call Sub_PowerAtCenterWavelength("ObservationLine2", x, True)
Call Sub_PowerAtWavelength(1.6, "ObservationLine2", x, True)

' Simulation and VB-post-data- analysis finished

""""Start of sample code for the power calculation""""
'Usage: Paste the script code between the marks of "Start of sample code for
the power calculation" and
' "End of sample code for the power calculation" to the end of your script, and
call the sub procedures.
'The result of power calculation will be saved to files at the same location as
your FDT file.
'For instance, if you have a FDT file D:\MyDataFile\FDT\coupler.fdt, and it has an
observation line
'named "ObservationLine1" :
'
' .....your script code.....
' For x=1 to NumIterations
' .....your script code.....
' ParamMgr.Simulate
' .....your script code.....
' Call Sub_CalcPowerSpectrum("ObservationLine1", x, True, 1.0, 3.0, 51)
' Call Sub_CalcNormalizedPowerSpectrum("ObservationLine1", x, True,
1.0, 3.0, 51, "InputPlane1")
' Call Sub_PowerAtCenterWavelength("ObservationLine1", x, True)
' Call Sub_PowerAtWavelength(2.45, "ObservationLine1", x, True)
' .....your script code.....
' Next
' .....your script code.....
'

'After the simulation, the following file will be generated under
D:\MyDataFile\FDT\.
```

```
' coupler_PowerSpectrum.txt
' coupler_PowerAtWavelength.txt
' coupler_PowerAtCenterWavelength.txt
' coupler_NormalizedPowerSpectrum.txt
.....

''''''''Calculate the Power At Center Wavelength''''''''
'LineName      - String - The name of the observation line
'IterationNum   - Integer - The current iteration number in case of sweep
simulation
'OutputIterationNum - Boolean - Indicate if the iteration number should be stored
into the file.
'Sample: Call Sub_PowerAtCenterWavelength("ObservationLine1", nIteration,
True)
Sub Sub_PowerAtCenterWavelength( LineName, IterationNum,
OutputIterationNum )
    Dim error_msg 'for error handling
    Dim fhs, ios 'for the output of the result
    Dim power_val 'the Power At Center Wavelength
    Dim observation_line 'The line object to the LineName.
    Dim file_for_output 'The file name for storing the result.

    'Get the observation line.
    Set observation_line = ObservePtMgr.GetObjFromID(LineName)
    'Calculate the power at center wavelength.
    power_val = observation_line.PowerAtCenterWavelength()

    'Save the result to the file.
    If AppMgr.RunsInSimulator() = True Then
        'Prepare the file for output.
        Set fhs = CreateObject("Scripting.FileSystemObject")
        file_for_output = GetOutputFileName("_PowerAtCenterWavelength.txt")
        'Open for appending
        Set ios = fhs.OpenTextFile(file_for_output, 8, True)

        'Is there an error during the calculation?
        If observation_line.HasErrorsInPowerCalc() = True Then
            error_msg = observation_line.GetErrorMsg()
            ios.WriteLine( error_msg )
        Else
            If OutputIterationNum Then
                ios.WriteLine(LineName&" -- Iteration "&CStr(IterationNum)&"
"&CStr(power_val))
            Else
                ios.WriteLine(CStr(power_val))
            End If
        End If
        ios.Close 'Close the file
    End If
End Sub

''''''''Calculate the Power At Wavelength''''''''
'Wavelength     - Double - The wavelength
'LineName        - String - The name of the observation line
'IterationNum     - Integer - The current iteration number in case of sweep
simulation
'OutputIterationNum - Boolean - Indicate if the iteration number should be stored
into the file.
'Sample: Call Sub_PowerAtWavelength(1.45, "ObservationLine1", nIteration,
True)
```

```

Sub Sub_PowerAtWavelength( Wavelength, LineName, IterationNum,
OutputIterationNum )
    Dim error_msg 'for error handling
    Dim fhs, ios 'for the output of the result
    Dim power_val 'the Power At Center Wavelength
    Dim observation_line 'The line object to the LineName.
    Dim file_for_output 'The file name for storing the result.

    'Get the observation line.
    Set observation_line = ObservePtMgr.GetObjFromID(LineName)
    'Calcualte the Power At Wavelength.
    power_val = observation_line.PowerAtWavelength(Wavelength)

    'Save the result to the file.
    If AppMgr.RunsInSimulator() = True Then
        'Prepare the file for output.
        Set fhs = CreateObject("Scripting.FileSystemObject")
        file_for_output = GetOutputFileName("_PowerAtWavelength.txt")
        'Open for appending
        Set ios = fhs.OpenTextFile(file_for_output, 8, True)

        'Is there an error during the calculation?
        If observation_line.HasErrorsInPowerCalc() = True Then
            error_msg = observation_line.GetErrorMsg()
            ios.WriteLine( error_msg )
        Else
            If OutputIterationNum Then
                ios.WriteLine(LineName&" -- Iteration "&CStr(IterationNum)&"
"&CStr(power_val))
            Else
                ios.WriteLine(CStr(power_val))
            End If
        End If
        ios.Close 'Close the file
    End If
End Sub

''''''''Calculate the Power Spectrum''''''''''
'LineName      - String - The name of the observation line
'IterationNum   - Integer - The current iteration number in case of sweep
simulation
'OutputIterationNum - Boolean - Indicate if the iteration number should be stored
into the file.
'StartWavelength - Double - The start wavelength
'EndWavelength   - Double - The end wavelength
'NumberOfPoints  - Integer - The number of points
'Sample: Call Sub_CalcPowerSpectrum(1.2, 2.54, 51, "ObservationLine1",
nIteration, True)
Sub Sub_CalcPowerSpectrum(LineName, IterationNum, OutputIterationNum,
StartWavelength, EndWavelength, NumberOfPoints)
    Dim error_msg 'for error handling
    Dim fhs, ios 'for the output of the result
    Dim power_val 'the Power At Center Wavelength
    Dim observation_line 'The line object to the LineName.
    Dim file_for_output 'The file name for storing the result.

    Set observation_line = ObservePtMgr.GetObjFromID(LineName)

    'Calcualte the power spectrum.

```



```

powerval = observation_line.CalcPowerSpectrum(StartWavelength,
EndWavelength, NumberOfPoints)

'Save the result to the file.
If AppMgr.RunsInSimulator() = True Then
'Prepare the file for output.
Set fhs = CreateObject("Scripting.FileSystemObject")
file_for_output = GetOutputFileName("_PowerSpectrum.txt")
'Open for appending
Set ios = fhs.OpenTextFile(file_for_output, 8, True)

If OutputIterationNum Then
ios.WriteLine("***** "&LineName&" *** Iteration
"&CStr(IterationNum)&" *****")
End If

'Is there an error during the calculation?
If observation_line.HasErrorsInPowerCalc() Then
error_msg = observation_line.GetErrorMsg()
ios.WriteLine( error_msg )
Else
Dim r_freq
Dim r_index
Dim freq_interval
Dim end_freq
Dim wave_final

end_freq = WaveToFreq(EndWavelength)
'Retrieve the power of each spectral point.
freq_interval = (WaveToFreq(StartWavelength) -
end_freq)/(NumberOfPoints - 1)
r_index = NumberOfPoints -1
For n_index = 0 to NumberOfPoints -1
r_freq = end_freq + r_index * freq_interval
wave_final = FreqToWave( r_freq )
power_val = observation_line.GetPowerAtSpectralPoint( n_index )
ios.WriteLine( CStr(wave_final)&" "&CStr(power_val) )
r_index = r_index - 1
Next
End If

ios.Close
End If
End Sub

""""""Calculate the Normalized Power Spectrum""""""
'LineName - String - The name of the observation line
'IterationNum - Integer - The current iteration number in case of sweep
simulation
'OutputIterationNum - Boolean - Indicate if the iteration number should be stored
into the file.
'StartWavelength - Double - The start wavelength
'EndWavelength - Double - The end wavelength
'NumberOfPoints - Integer - The number of points
'InputPlaneName - String - The power to be normalized with
'Sample: Call Sub_CalcPowerSpectrum(1.2, 2.54, 51, "ObservationLine1",
nIteration, True)
Sub Sub_CalcNormalizedPowerSpectrum(LineName, IterationNum,
OutputIterationNum, StartWavelength, EndWavelength, NumberOfPoints,
InputPlaneName)

```

```

Dim error_msg 'for error handling
Dim fhs, ios 'for the output of the result
Dim power_val 'the Power At Center Wavelength
Dim observation_line 'The line object to the LineName.
Dim file_for_output 'The file name for storing the result.

Set observation_line = ObservePtMgr.GetObjFromID(LineName)

'Calculalte the power spectrum.
power_val =
observation_line.CalcNormalizedPowerSpectrum(StartWavelength,
EndWavelength, NumberOfPoints, InputPlaneName)

'Save the result to the file.
If AppMgr.RunsInSimulator() = True Then
    'Prepare the file for output.
    Set fhs = CreateObject("Scripting.FileSystemObject")
    file_for_output = GetOutputFileName("_NormalizedPowerSpectrum.txt")
    'Open for appending
    Set ios = fhs.OpenTextFile(file_for_output, 8, True)

    If OutputIterationNum Then
        ios.WriteLine("***** "&LineName&" *** Iteration
"&CStr(IterationNum)&" *****")
    End If

    'Is there an error during the calculation?
    If observation_line.HasErrorsInPowerCalc() = True Then
        error_msg = observation_line.GetErrorMsg()
        ios.WriteLine( error_msg )
    Else
        Dim r_freq
        Dim r_index
        Dim freq_interval
        Dim end_freq
        Dim wave_final

        end_freq = WaveToFreq(EndWavelength)
        'Retrieve the power of each spectral point.
        freq_interval = (WaveToFreq(StartWavelength) -
end_freq)/(NumberOfPoints - 1)
        r_index = NumberOfPoints -1
        For n_index = 0 to NumberOfPoints -1
            r_freq = end_freq + r_index * freq_interval
            wave_final = FreqToWave( r_freq )
            power_val = observation_line.GetNormalizedPowerAtSpectralPoint(
n_index )
            ios.WriteLine( CStr(wave_final)&" "&CStr(power_val) )
            r_index = r_index - 1
        Next
    End If

    ios.Close
End If
End Sub

'Helper function.
'Wavelength - Double - The wavelength
'Sample: freq = WaveToFreq( 2.3 )
Function WaveToFreq( WaveLength )

```

```

Dim SPEED_LIGHT_MS2
Dim THZ_TO_HZ
Dim M_TO_UM
SPEED_LIGHT_MS2 = 299792458.0
THZ_TO_HZ = 1.0E12
M_TO_UM = 1.0E6

If( WaveLength <> 0.0 ) Then
    WaveToFreq = SPEED_LIGHT_MS2 /( THZ_TO_HZ * WaveLength ) *
M_TO_UM
Else
    WaveToFreq = 0.0
End If
End Function

'Helper function.
'Frequency - Double - The frequency
'Sample: wav = FreqToWave( 299.56 )
Function FreqToWave( Frequency )
    Dim SPEED_LIGHT_MS2
    Dim THZ_TO_HZ
    Dim M_TO_UM
    SPEED_LIGHT_MS2 = 299792458.0
    THZ_TO_HZ = 1.0E12
    M_TO_UM = 1.0E6

    If( Frequency <> 0.0 ) Then
        FreqToWave = SPEED_LIGHT_MS2 /( THZ_TO_HZ * Frequency ) * M_TO_UM
    Else
        FreqToWave = 0.0
    End If
End Function

'Helper function
'Postfix - String - will be appended to the file(of FDT) name.
'Sample: file_name = GetOutputFileName("ThePower.txt")
Function GetOutputFileName( Postfix )
    Dim project_folder
    Dim file_name

    project_folder = AppMgr.GetProjectFolderName()
    file_name = AppMgr.GetProjectFileName()
    file_name = Left(file_name, Len(file_name) - 4)
    file_name = file_name&PostFix
    GetOutputFileName = project_folder&file_name
End Function
""End of sample code the for power calculation""

```



Bibliografía del Anexo III. VB Script:

[III.1] “OptiFDTD Visual Basic Reference”, Optiwave.

[III.2] “OptiFDTD 8.0. Technical Background and Tutorials”, Optiwave.



# [Anexo IV. Condiciones de Contorno y Modelos de Materiales]



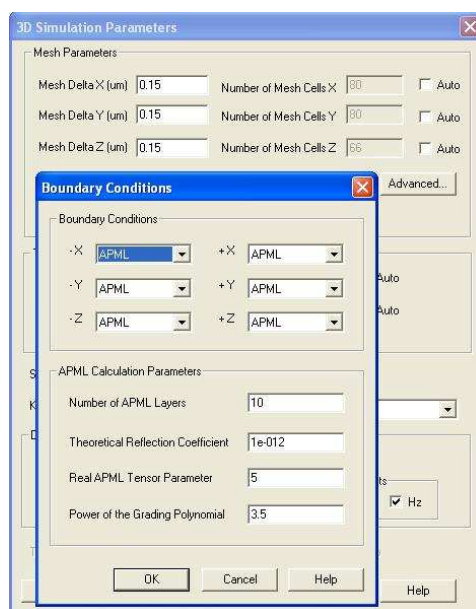
En este anexo se ha preparado una breve descripción de las condiciones de contorno utilizadas en el paquete software **OptiFDTD 8.0**, así como una descripción de los modelos de los materiales metálicos dispersivos o con pérdidas entre otros. El fin de este anexo es dar a conocer las modificaciones del algoritmo básico FDTD en el contorno de la ventana computacional donde se aplican numéricamente unas condiciones de contorno absorbentes (ABC, Absorbing Boundary Conditions).

Se procederá a continuación a explicar brevemente las características de las condiciones de contorno utilizadas en el artículo [IV.1], puesto que son diferentes de las condiciones de contorno utilizadas en el paquete software **OptiFDTD 8.0**, para posteriormente describir los modelos de los materiales utilizados en el software:

### IV.1 Condiciones de Contorno.

Las condiciones de contorno absorbentes (ABC) se aplican en los límites del layout en el que se aplica el algoritmo numérico FDTD, con el fin de absorber la onda electromagnética sin reflexiones que puedan alterar los resultados. Sobre este tipo de condiciones de contorno se explicaran dos métodos, el Mur's Absorbing Boundary Conditions, utilizados en el artículo [IV.1], y el Anisotropic Perfect Matched Layer de Berenger, utilizado en el OptiFDTD 8.0.

Para acceder a la ventana de selección de las condiciones de contorno de la simulación simplemente hay que pulsar el botón *Advanced* en la ventana de los parámetros de la simulación tanto en 2D como en 3D, tal y como se muestra en la **figura IV.1**



**Figura IV.1 Acceso a la ventana de selección y modificación de las condiciones de contorno.**

El software también tiene la opción de usar las condiciones de contorno PEC (Perfect Electric Conductor) y PMC (Perfect Magnetic Conductor), que utilizándolas en según qué condiciones puede reducir considerablemente el tiempo de simulación, así como las condiciones de contorno PBC (Periodic Boundary Condition), que también serán explicadas brevemente en este anexo.

### IV.1.1 Mur's Absorbing Boundary Conditions (ABC).

Las ABC de Mur [IV.2] se han utilizado en varios paquetes de simulación FDTD, pero actualmente la comunidad investigadora prefiere usar las condiciones APML que utiliza el paquete software OptiFDTD, por lo que las condiciones de contorno APML están más extendidas en la actualidad. Gerrit Mur propuso el uso de estas condiciones de contorno en un artículo [IV.2] publicado en 1981, aunque posteriormente fueron sustituidas por las condiciones PML de J. P. Berenger [IV.3].

Las condiciones de contorno se deben aplicar porque el dominio en el que el campo electromagnético debe ser calculado es infinito, es decir, sin límites. Por tanto, deben aplicarse unas condiciones en el contorno del dominio de simulación que imiten esa situación. Las ABC de Mur surgen de la necesidad de obtener unas condiciones de contorno absorbentes sin la desventaja que había en ese momento de generar reflexiones considerables cuando las ondas electromagnéticas cerca del límite del dominio de simulación no se propagaban en una dirección específica (normal al contorno de la malla). Ninguna teoría general anterior a la descrita por Mur podía mejorar en este aspecto, por lo que su propuesta describía un método potencialmente superior a todos los anteriores y aplicables a simulaciones en 2D y 3D.

Mur considero dos aproximaciones a este problema, resultando la segunda y las derivadas de esta las menos sujetas a problemas de reflexión (cálculos numéricos en [IV.2]). La **figura IV.2** muestra las simulaciones llevadas a cabo por Mur, en las que se observa como la segunda aproximación se aproximaba mejor a la solución exacta debido a la absorción de la onda electromagnética en el límite del dominio de simulación considerado.

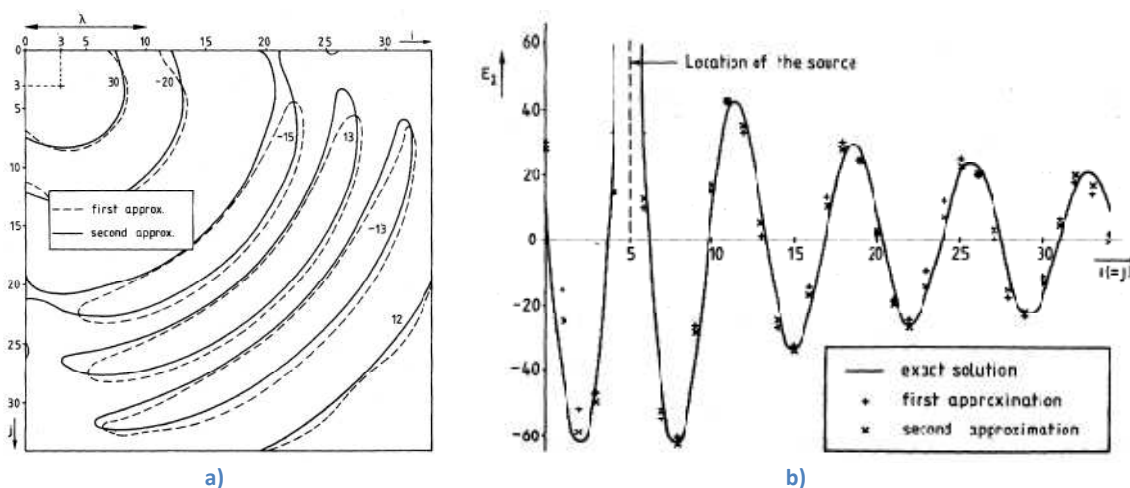


Figura IV. 2 Simulación realizada mediante el método FDTD con las ABC de Mur en a), y comparación de los resultados obtenidos en los que se observa una mayor aproximación a la solución exacta para el caso de la segunda aproximación. Imagen obtenida de [IV.2].

### IV.1.2 Anisotropic Perfect Layer Matched Boundary Conditions (APML).

Las condiciones de contorno APML son las más utilizadas en el OptiFDTD 8.0, y constituyen una de sus mejores características. Las condiciones de contorno APML, o el llamado Un-split PML (UPML), son físicas más que numéricas porque su implementación está basada en la formulación Maxwelliana más que en modelos numéricos. Las propiedades

## Anexo IV. Condiciones de Contorno y Modelos de Materiales

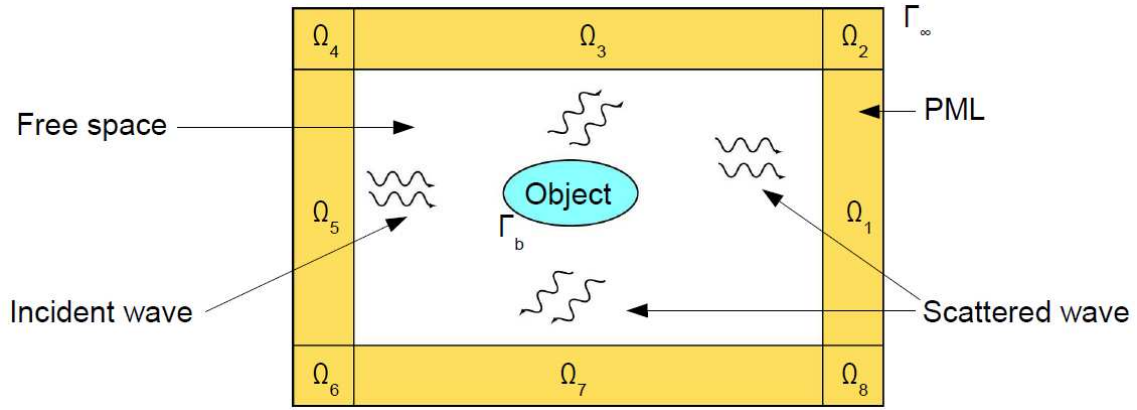
absorbentes son físicamente equivalentes a las propiedades de un medio uni-axial anisotrópico con los siguientes tensores de permitividad y permeabilidad:

$$\hat{\varepsilon} = \varepsilon \hat{S}$$

$$\hat{\mu} = \mu_0 \hat{S}$$

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} s^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & s & 0 \\ 0 & 0 & s \end{pmatrix}; \quad s = \kappa - i \frac{\sigma}{\varepsilon_0 \omega}$$

Una onda plana incidente en la interfase de un medio con otro determinado de esa manera se transmite íntegramente a él, sin reflexiones. La propiedad de no reflexión es completamente independiente del ángulo de incidencia, polarización y frecuencia de la onda incidente. La implementación numérica de las condiciones de contorno UPML en una ventana computacional en 2D requiere de la introducción de capas absorbentes PML en todos los límites, como muestra la **figura IV.3**.



**Figura IV. 3 Regiones donde se aplican las condiciones APML**

Las regiones de las esquinas ( $\Omega_2$ ,  $\Omega_4$ ,  $\Omega_6$  y  $\Omega_8$  en la **figura IV.3**) requieren una atención especial. En estas regiones el tensor  $\hat{S}$  debe modificarse como se muestra a continuación:

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} s_x^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & s_x & 0 \\ 0 & 0 & s_x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_z & 0 & 0 \\ 0 & s_z & 0 \\ 0 & 0 & s_z^{-1} \end{pmatrix}$$

$$s_x = \kappa_x - i \frac{\sigma_x}{\varepsilon_0 \omega}$$

$$s_z = \kappa_z - i \frac{\sigma_z}{\varepsilon_0 \omega}$$

La minimización de la reflectividad de las capas APML requiere el escalado espacial del perfil de conductividad desde cero (en la interfase de la PML) hasta un valor máximo al final ventana computacional

$$\sigma(x) = \sigma_{max} \left( \frac{x}{L} \right)^m, \quad \kappa(x) = 1 + (\kappa_{max} - 1) \left( \frac{x}{L} \right)^m$$

Donde  $L$  es el grosor de las APML. Los valores típicos para el parámetro  $m$  están entre el 2 y el 4. Para una explicación más exhaustiva mirar [IV.3].

### IV.1.3 PEC/PMC Boundary Conditions.

OptiFDTD 8.0 provee la opción de utilizar las condiciones de contorno de un Conductor Eléctrico Perfecto (Perfect Electric Conductor, PEC) y de un Conductor Magnético Perfecto (Perfect Magnetic Conductor, PMC). Estas condiciones de contorno se pueden seleccionar en la ventana de la **figura IV.1** en cualquier límite del plano/volumen de la simulación, y pueden usarse conjuntamente con las condiciones de contorno APML. Mediante la combinación de las condiciones de contorno PEC, PMC y APML se pueden lograr una reducción del dominio de simulación para estructuras simétricas, periódicas o PBG (cristales fotónicos).

Estas condiciones de contorno se utilizan como base para el método de las imágenes electromagnéticas con el objetivo de reducir el dominio de la simulación. El valor imagen de los campos eléctricos y magnéticos a través de un plano magnético o eléctrico perfectos se muestran en la **figura IV.4**:

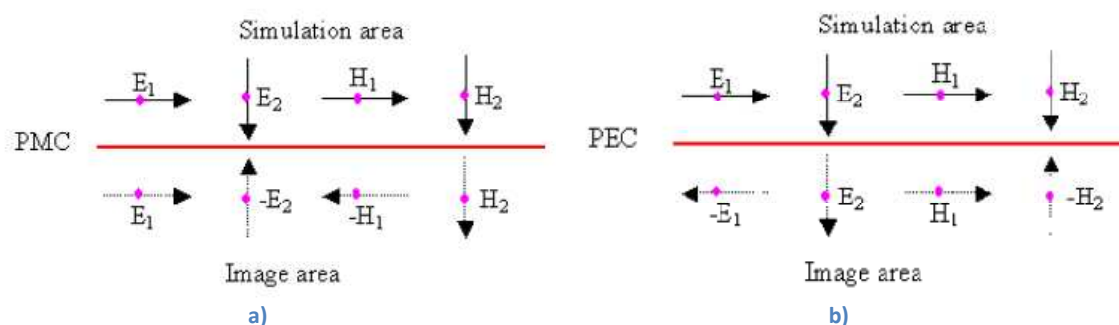


Figura IV. 4 a) y b) muestran las imágenes de los campos E y H obtenidas al aplicar las condiciones de contorno PEC y PMC.

Para la **figura IV.4-a** el campo eléctrico perpendicular a al plano PMC es cero, lo mismo que el campo magnético paralelo al plano PMC, es decir,  $E_{\perp} = 0$  y  $H_{\parallel} = 0$ . Para la **figura IV.4-b** sucede lo contrario, en este caso el campo eléctrico paralelo al plano PEC es cero y el campo magnético perpendicular al plano PEC también, es decir,  $H_{\perp} = 0$  y  $E_{\parallel} = 0$ .

Un ejemplo de cómo usar estas condiciones de contorno para reducir el dominio de simulación puede verse en la **figura IV.5**, donde una celosía cuadrada 2D puede reducirse a una línea de pilares o agujeros utilizando las condiciones de contorno adecuadas en los límites del plano.



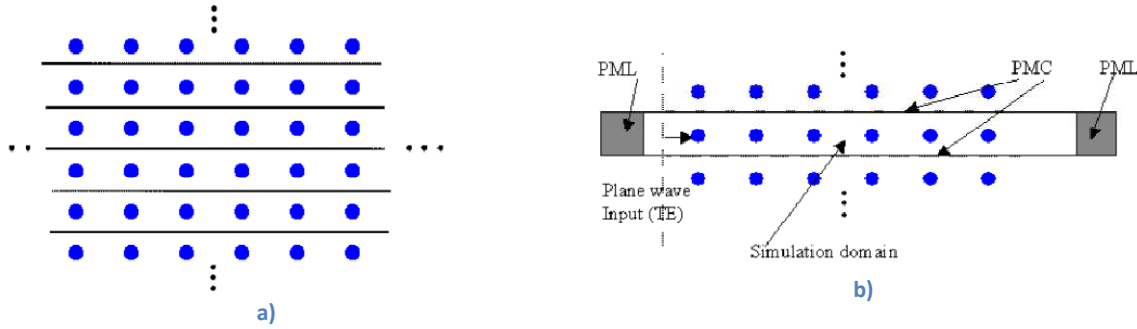


Figura IV. 5 a) celosía cuadrada 2D, b) dominio de la simulación de la celosía cuadrada al aplicar condiciones de contorno PMC.

Como se observa, el uso de la polarización TE con condiciones de contorno PMC en los ejes de simetría de la celosía a lo largo de la dirección de propagación, y de condiciones PML al final y al principio del dominio de la simulación para evitar reflexiones reduce notablemente el tamaño del plano de simulación. La fuente debe ser de perfil rectangular para que se cumpla la simetría de la red.

En simulaciones 3D se depende de la polarización de la onda electromagnética para situar las condiciones de contorno adecuadas, tal y como pasa con las simulaciones 2D. Si se utiliza polarización en el eje y, entonces el plano XZ debería tener un límite PEC, mientras que en el contorno del plano YZ debería ser puesto en PMC. Si la polarización es en el eje x, entonces las condiciones de contorno deberían ponerse al revés que en la situación anterior.

### IV.1.4 Periodic Boundary Conditions.

El OptiFDTD 8.0 también provee la opción de usar unas condiciones de contorno periódicas (Periodic Boundary Condition, PBC) simplificadas que se pueden utilizar a la vez con las condiciones de contorno APML, PEC o PMC. Con las PBC se pueden crear simulaciones normales o también simulaciones de estructuras periódicas.

Las PBC simplificadas se basan en el teorema de Bloch, tal y como sucedía con el PWE Band Solver del Anexo II. Para una estructura periódica, la función de la onda se puede escribir como una combinación de una componente periódica y una componente de onda, como se muestra a continuación:

$$\psi(\gamma + \Delta\gamma) = \varphi(\gamma)\exp(ik\Delta\gamma)$$

Esta ecuación necesita tener un valor predefinido para el vector k, cosa que no es fácilmente realizable para una simulación FDTD, especialmente para una onda en forma de pulso. Por esta razón, en las simulaciones se simplifica poniendo el vector k en una dirección específica, que resulta en la dirección de propagación de la onda, y que convierte la ecuación anterior en:

$$\psi(\gamma + \Delta\gamma) = \varphi(\gamma)$$

$\Delta\gamma$  es la longitud periódica o más bien, la longitud que hay entre los dos bordes en los que están situados las condiciones PBC.  $\varphi(\gamma)$  es la componente de campo en el límite del

dominio de la simulación.  $\psi(\gamma + \Delta\gamma)$  es el valor de la componente de campo en el límite del dominio de la simulación en el lado contrario de  $\varphi(\gamma)$ .

### IV.2 Modelos de Materiales.

Al utilizar el método FDTD, carente de aproximaciones para la propagación del campo electromagnético, en el que la luz es modelada en toda su riqueza y complejidad, se pueden modelar una gran variedad de materiales en este contexto. En este apartado se realizará un pequeño resumen de las principales características de los modelos que se pueden usar en las simulaciones.

El acceso a los modelos de los materiales (**figura IV.6**) se puede realizar desde varios sitios, el más general es entrando desde el menú *Edit* de la barra de herramientas, *Edit > Profiles and materials...* Para crear un nuevo material basta con pulsar con el botón derecho sobre cualquiera de los tipos de materiales y elegir *New*.

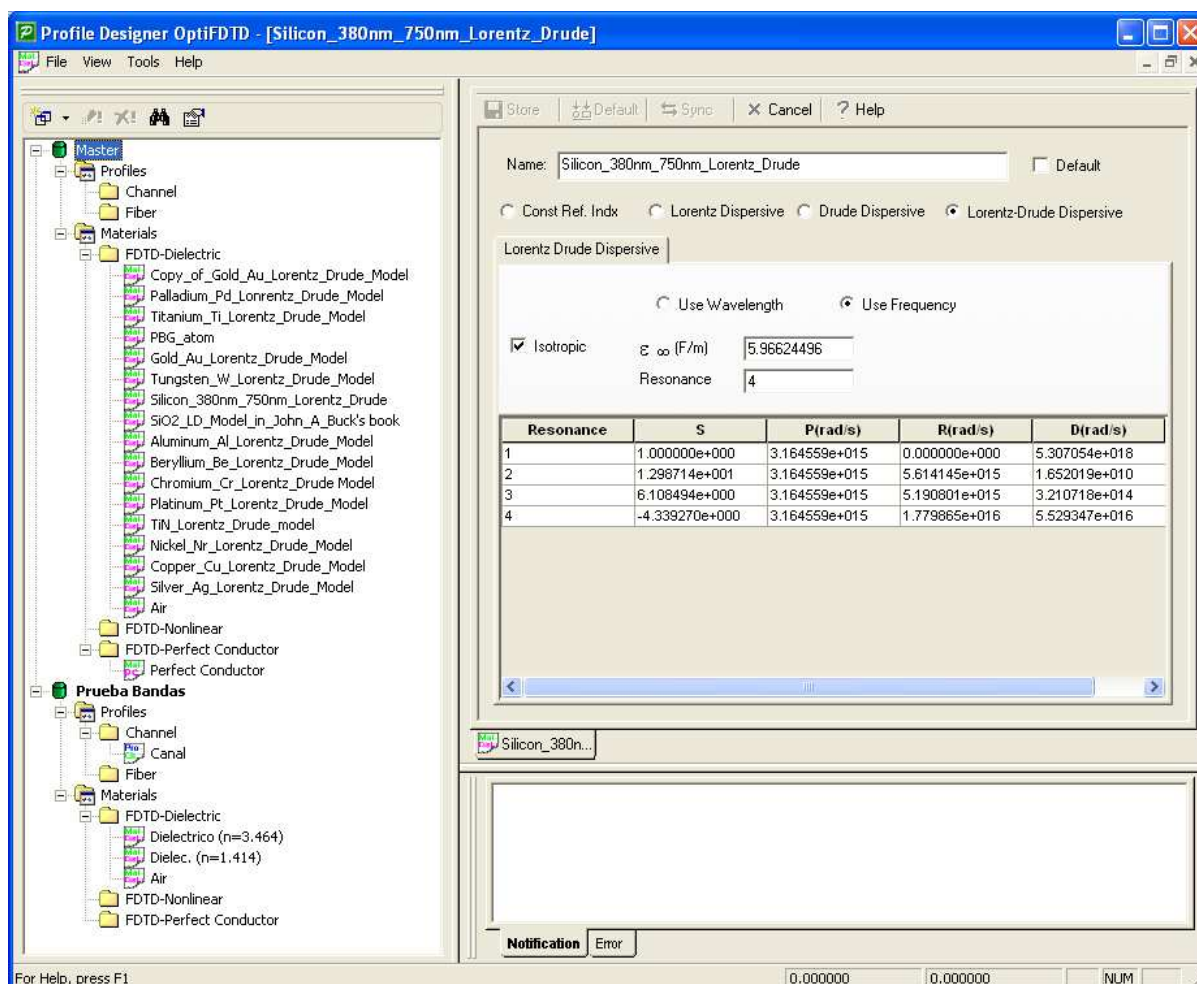


Figura IV. 6 Ventana Profile Designer donde vienen incluidos algunos modelos de materiales.

Para no tener problemas con las simulaciones y llegar a resultados convergentes hay que poner un paso temporal y espacial que cumplan ciertas condiciones. Los pasos espaciales y temporales se relacionan con la precisión, la dispersión numérica y la estabilidad del método

FDTD. Para mantener los resultados tan precisos como sea posible, con poca dispersión numérica, el tamaño de malla suele acotarse a que por lo menos haya diez pasos por longitud de onda. Esto significa que como mínimo los pasos espaciales deben tener, en un eje, generalmente el de propagación, una longitud de  $1/10\lambda$  de la longitud de onda más corta empleada en la simulación.

La ecuación sugerida para el cumplimiento del paso espacial tiene en cuenta los materiales empleados en la simulación:

$$\text{minimum}(\Delta x, \Delta y, \Delta z) \leq \frac{\lambda_{\min}}{10n_{\max}}$$

Donde  $n_{\max}$  es el valor máximo del índice de refracción en el dominio de la simulación.

Una vez determinado el tamaño de celda, el tamaño máximo para el paso temporal debe cumplir la condición de Courant-Friedrichs-Levy:

$$\Delta t \leq \frac{1}{v \sqrt{\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2} + \frac{1}{(\Delta z)^2}}}$$

Donde  $v$  es la velocidad de la luz en el medio. Para el caso de simulaciones en 2D la condición CFL queda de la siguiente manera:

$$\Delta t \leq \frac{1}{v \sqrt{\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta z)^2}}}$$

### IV.2.1 Dieléctricos con Pérdidas.

Antes de proceder a una descripción más detallada debería remarcarse que en el dominio temporal todos los campos ( $H_x$ ,  $E_y$ ,  $H_z$ ) son reales. De este modo, las pérdidas se tienen en cuenta mediante la conductividad distinta de cero,  $\sigma$ , del medio:

$$\nabla \times \vec{H} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \sigma \vec{E} = i\omega \varepsilon_0 \left( \varepsilon_r - i \frac{\sigma}{\omega \varepsilon_0} \right) \vec{E} = i\omega \varepsilon_0 \varepsilon_{eff} \vec{E}$$

Donde:

$$\varepsilon_{eff} = \varepsilon_r - i \frac{\sigma}{\omega \varepsilon_0} = \varepsilon_r^{Re} + i \varepsilon_r^{Im} = (n + i\kappa)^2$$

En este punto se asume que  $\vec{E} \propto e^{-i\omega t}$  y entonces el cambio  $\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow i\omega$  se corresponde con el cambio a dominio frecuencial mediante la transformada de Fourier.

Las partes real e imaginaria de la permitividad puede expresarse mediante la parte real y la parte imaginaria del índice de refracción:

$$\varepsilon_e^{Re} = n^2 - \kappa^2, \quad \varepsilon_r^{Im} = 2n\kappa, \quad \kappa = -\sigma/2\varepsilon_0\omega n$$

Este paso hace equivalentes la aproximación por índice de refracción y por conductividad. Las pérdidas se modelan con la parte imaginaria del índice de refracción.

### IV.2.2 Materiales con Dispersión Lorentziana.

Se llaman materiales con dispersión Lorentziana a aquellos materiales para los que la dependencia con la frecuencia de la permitividad dieléctrica puede ser descrita como la suma de múltiples funciones de resonancia Lorentzianas. Es decir:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \sum_{m=1}^N \frac{\chi_0 G_m \omega_{0m}^2}{\omega_{0m}^2 + i\Gamma_m \omega - \omega^2}$$

Donde  $\sum_{m=1}^N G_m = 1$ ,  $\omega_{0m}$  son las frecuencias de resonancia,  $G_m$  está relacionado con las fuerzas del oscilador,  $\Gamma_m$  es el coeficiente amortiguamiento,  $\varepsilon_\infty$  es la permitividad a una frecuencia infinita y  $\chi_0 = \varepsilon_s - \varepsilon_\infty$  es la permitividad a  $\omega = 0$ .

En el caso sin pérdidas esta ecuación está directamente relacionada con la ecuación de Sellmeier en la cual las tres resonancias pueden representarse así:

$$n^2 = \varepsilon_\infty + \frac{A_1 \lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_1^2} + \frac{A_2 \lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_2^2} + \frac{A_3 \lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_3^2}$$

Siendo  $A_m = \chi_0 G_m$  para  $m = 1, 2, 3$

En el caso con pérdidas, la ecuación de Sellmeier puede escribirse de una forma generalizada, teniendo en cuenta el coeficiente de amortiguamiento distinto de cero,  $\Gamma_m$ , así como la anisotropía en las propiedades de la dispersión.

$$n^2 = \varepsilon_\infty + \frac{A_1 \lambda^2}{\lambda^2 + i\Gamma_{\lambda 1} - \lambda_1^2} + \frac{A_2 \lambda^2}{\lambda^2 + i\Gamma_{\lambda 2} - \lambda_2^2} + \frac{A_3 \lambda^2}{\lambda^2 + i\Gamma_{\lambda 3} - \lambda_3^2}$$

Hay diferentes maneras de implementar esto con el formalismo propio del metodo FDTD. Se usa la función de susceptibilidad dielectrica relacionada con la polarización:

$$\chi(\omega) = \frac{\chi_0 \omega_0^2}{\omega_0^2 + i\Gamma\omega - \omega^2}$$

Y la relación entre la polarización y el campo eléctrico es  $P_y = \varepsilon_0 \chi(\omega) E_y$ . Tomando la transformada de Fourier de esta ecuacion se obtiene la siguiente ecuacion diferencial:

$$\frac{\partial^2 P_y}{\partial t^2} + \Gamma \frac{\partial P_y}{\partial t} + \omega_0^2 P_y = \varepsilon_0 \chi_0 \omega_0^2 E_y$$

Sustituyendo  $\frac{\partial P_y}{\partial t} = J_y$  en la ecuacion diferencial, se tiene:

$$\frac{\partial J_y}{\partial t} + \Gamma J_y + \omega_0^2 P_y = \varepsilon_0 \chi_0 \omega_0^2 E_y$$

Esta ultima ecuación se resuelve numericamente junto con la ecuación siguiente:

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} = \frac{\partial D_y}{\partial t} = \frac{\partial E_y}{\partial t} + \frac{\partial P_y}{\partial t}$$

### IV.2.3 Materiales No-Lineales.

En general, el comportamiento no-lineal es debido a la dependencia de la polarización con el campo eléctrico aplicado  $E(t)$ . Asumiendo un material dispersivo isotrópico, las ecuaciones de Maxwell son:

$$\mu_0 \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = -\nabla \times \vec{E}$$

$$\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \nabla \times \vec{H}$$

$$\vec{D} = \vec{P}^L + \vec{P}^{NL} + \sum_{m=1}^M \vec{P}_m^D$$

$$\frac{\partial^2 \vec{P}_m^L}{\partial t^2} + \Gamma_m \frac{\partial \vec{P}_m^L}{\partial t} + \omega_m^2 \vec{P}_m^L = \varepsilon_0 \chi_0 G_m \omega_m^2 \vec{E}$$

Donde  $\vec{P}^L$  representa la polarización lineal, en general  $\vec{P}^L = \varepsilon_L \varepsilon_0 \vec{E}$ .  $\vec{P}_m^D$  es la polarización dispersiva que está controlada por el modelo de Lorentz en la última ecuación y que denota la polarización no-lineal. La polarización no-lineal,  $\vec{P}_m^{NL}$ , es la que produce los distintos fenómenos de no-linealidad. En el OptiFDTD 8.0 encontramos cuatro tipos:

#### a. Materiales de dispersión no-lineal de Segundo orden

En este modelo, la densidad de flujo eléctrico  $\vec{D}$  es:

$$\vec{D} = \varepsilon_L \varepsilon_0 \vec{E} + \varepsilon_0 \chi^{(2)} = \vec{E} \vec{E} + \sum_{m=1}^M \vec{P}_m^D$$

Donde  $\varepsilon_L$  es la permitividad relativa lineal y  $\chi^{(2)}$  es la susceptibilidad isotrópica de Segundo orden, que son valores reales. Para simular el efecto no-lineal de segundo orden hay que introducir estos dos parámetros

### b. Materiales de dispersión no-lineal de Tercer orden

Tal y como sucede con la dispersión no-lineal de segundo orden, OptiFDTD toma la susceptibilidad de tercer orden para calcular la polarización no lineal:

$$\vec{D} = \varepsilon_L \varepsilon_0 \vec{E} + \varepsilon_0 \chi^{(3)} = \vec{E} \vec{E} \vec{E} + \sum_{m=1}^M \vec{P}_m^D$$

Donde  $\varepsilon_L$  es la permitividad relativa lineal y  $\chi^{(3)}$  es la susceptibilidad isotrópica de tercer orden. Para simular el efecto no-lineal de tercer orden hay que introducir estos dos parámetros

### c. Efecto de dispersión Kerr

Si la escala temporal sobre la cual el cambio en el medio es mayor que la anchura del pulso electromagnético, se debería tener en cuenta los efectos de la respuesta temporal finita del medio. El software trata el efecto no-lineal con una respuesta temporal finita de una manera casi instantánea resolviendo la ecuación de la susceptibilidad simultáneamente con la ecuación de Maxwell:

$$\vec{D} = \varepsilon_L \varepsilon_0 + \vec{P}^{NL} + \sum_{m=1}^M \vec{P}_m^D$$

$$\vec{P}^{NL} = \varepsilon_0 \chi^{NL}(\vec{r}, t, |E|^2) \vec{E}$$

$$\frac{\partial \chi^{NL}}{\partial t} + \frac{1}{\tau} \chi^{NL} = \frac{1}{\tau} \varepsilon_2 |E|^2$$

Donde  $\varepsilon_L$  es la permitividad relativa lineal,  $\chi^{NL}$  es la susceptibilidad no-lineal,  $\tau$  es la respuesta temporal, y  $\varepsilon_2$  es la permitividad del modelo de Kerr.

Para simular el efecto Kerr, entonces hay que introducir los parámetros  $\varepsilon_L$ ,  $\tau$  y  $\varepsilon_2$ . El modelo para el efecto Kerr es bueno para una alta no-linealidad.

### d. Efecto de dispersión Raman

El modelo Raman permite otra manera de simular el efecto no-lineal, donde la susceptibilidad no-lineal se modela con una ecuación de derivadas parciales de segundo orden que está relacionada con la longitud de onda de resonancia y el tiempo de respuesta:

$$\vec{D} = \varepsilon_L \varepsilon_0 + \vec{P}^{NL} + \sum_{m=1}^M \vec{P}_m^D$$

$$\vec{P}^{NL} = \varepsilon_0 \chi^{NL} \vec{E}$$

$$\frac{\partial^2 \chi^{NL}}{\partial t^2} + \omega_R^2 \tau_R \frac{\partial \chi^{NL}}{\partial t} + \omega_R^2 \chi^{NL} = \varepsilon_R \omega_R^2 |E|^2$$

Donde  $\varepsilon_L$  es la permitividad relativa lineal,  $\chi^{NL}$  es la susceptibilidad no-lineal,  $\tau_R$  es la respuesta temporal,  $\varepsilon_R$  es la permitividad del modelo de Raman y  $\omega_R$  es la frecuencia de resonancia del modelo Raman.

Para simular el efecto Raman, se deben introducir cuatro parámetros:  $\varepsilon_L$ ,  $\varepsilon_R$ ,  $\tau_R$ , y  $\omega_R$ .

**Nota:** Para observar efectos no-lineales con estos modelos, se requiere una intensidad de luz alta, por lo que si no se tiene en cuenta esto, podrían no observarse efectos no-lineales.

### IV.2.4 Modelo de Lorentz-Drude.

La función dieléctrica compleja para algunos metales y plasma de superficie puede expresarse de la siguiente forma:

$$\varepsilon_r(\omega) = \varepsilon_r^f(\omega) + \varepsilon_r^b(\omega)$$

De esta forma se separan explícitamente los efectos intrabanda (efectos de electrones libres) de los efectos interbanda (electrones en los límites). La parte de intrabanda,  $\varepsilon_r^f(\omega)$ , de la función dieléctrica viene descrita por el modelo Drude de electrones libres:

$$\varepsilon_r^f(\omega) = 1 + \frac{\Omega_p^2}{j\omega\Gamma_0 - \omega^2}$$

La otra parte de la función dieléctrica, la de interbanda, se describe mediante el modelo de Lorentz:

$$\varepsilon_r^b(\omega) = \sum_{m=1}^M \frac{\Omega_p^2}{\omega_m^2 - \omega^2 + j\omega\Gamma_m}$$

Donde  $m$  es el número de oscilaciones con frecuencia  $\omega_m$  y tiempo de vida  $1/\Gamma_m$ .

$\Omega_p = \sqrt{G_m} \omega_p$  es la frecuencia de plasma asociada con la transiciones intrabandas.

El modelo de Lorentz-Drude puede expresarse de una forma más general con la siguiente ecuación:

$$\varepsilon_r(\omega) = \varepsilon_{r,\infty} + \sum_{m=1}^M \frac{G_m \Omega_m^2}{\omega_m^2 - \omega^2 + j\omega\Gamma_m}$$

Donde  $\varepsilon_{r,\infty}$  es la permitividad relativa a frecuencia infinita.  $\Omega_m$  es la frecuencia de plasma,  $\omega_m$  es la frecuencia de resonancia y  $\Gamma_m$  es el factor amortiguamiento o frecuencia de colisión.

## Anexo IV. Condiciones de Contorno y Modelos de Materiales

Esta ecuación esta en el dominio frecuencial, por lo tanto hay que transformarla al dominio temporal para poder usarla mediante el método FDTD. En el dominio temporal el modelo de Lorentz-Drude puede expresarse de la siguiente manera:

$$\mu_0 \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = \nabla \times \vec{E}$$

$$\varepsilon_{r,\infty} \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \sum_{m=0}^M \frac{\partial \vec{P}_m}{\partial t} = -\nabla \times \vec{H}$$

$$\frac{\partial^2 \vec{P}_m}{\partial t^2} + \Gamma_m \frac{\partial \vec{P}_m}{\partial t} + \omega_m^2 \vec{P}_m = \varepsilon_0 G_m \Omega_m^2 \vec{E}$$

Es de esta última ecuación de donde se puede derivar el algoritmo FDTD. En los modelos mostrados en el simulador, se muestran de la siguiente forma.

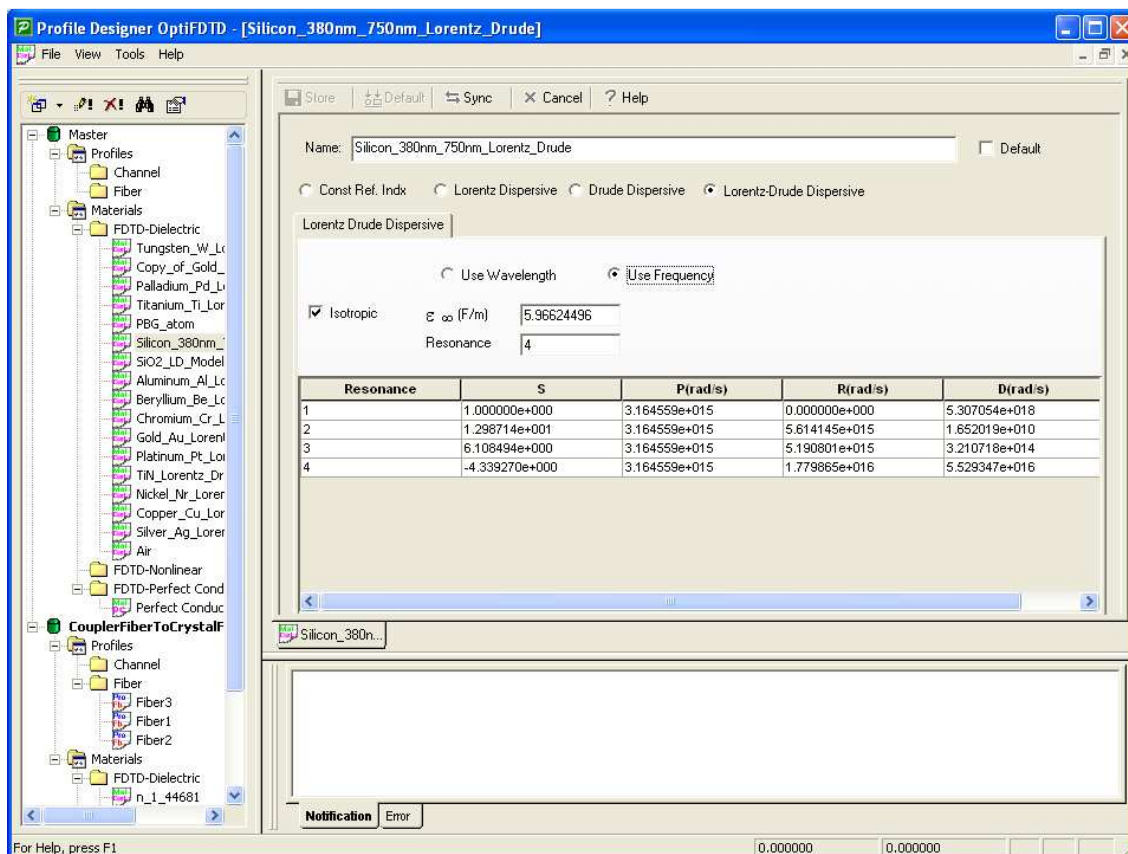


Figura IV. 7

Donde S es la fortaleza de los correspondientes términos de resonancia, P(rad/s) es la frecuencia de plasma, R(rad/s) es la frecuencia de resonancia y D(rad/s) es la frecuencia de colisión.

En [IV.4], pagina 26 en adelante, se pueden encontrar todos los modelos y los parámetros de Lorentz-Drude incluidos en el paquete software OptiFDTD 8.0.



## Anexo IV. Condiciones de Contorno y Modelos de Materiales

---

Bibliografía del Anexo IV. Condiciones de Contorno y Modelos de Materiales:

[IV.1] “Specific detection of proteins using photonic cristal waveguides”, S.C. Buswell, V.A. Wright, J. M. Buriak, V. Van, S. Evoy

[IV.2] “Absorbing boundary conditions for the Finite-Difference approximation of the Time-Domain electromagnetic-field equations”, Gerrit Mur.

[IV.3] “A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves”, J. P. Berenger.

[IV.4] “OptiFDTD 8.0. Technical Background and Tutorials”, Optiwave.

